量子力学

砂川重信著

岩波書店

量 子 力 学

量 子 力 学

砂 川 重 信 著

岩 波 書 店

まえがき

この書物は，大学の3〜4年程度の理工系学生を対象とする量子力学のテキスト，あるいは参考書として著わされたものである．

量子力学の誕生から60年あまりを経て，なお"観測の問題"などに関する論議を残しながらも，それは古典力学や古典電磁気学などと並んで，いまや物理学の"古典"となりつつあるといってよいだろう．事実，筆者らがはじめて量子力学にお目にかかった時代とちがって，現在では，それは理学部物理学科だけの専門課目ではなく，広く化学・生物系はもとより，工学系の学科においても必修の課目となっている．

論語の一節に，「学びて思わざれば則ち罔(くら)し，思いて学ばざれば則ち殆(あや)うし」という有名な言葉がある．学習してさらに創造性を発揮するには，できる限り若い時期に正確な知識を身につけておかなければならない．しかし，自然科学の発展の著しい現代においては，研究の第一線に立つまでに学ぶべき課程が余りにも多すぎて，このことが若い学生にとって大きな負担となっている．このような状況のもとで本格的に量子力学を学ぶためには，適当な厚さで，分かりやすく，そして効率的なテキストの存在が不可欠であろう．現在，手に入りやすい量子力学の本格的テキストとしては，Dirac や Messiah などによる名著があるが，前者は現代の多くの学生にとって余りにも難解であり，また後者は余りにも大部にすぎ，学部上級のテキストとして利用するのは困難であろう．一方，わが国の著者によるものの多くは全くの入門書であり，それらの内容は，量子力学を本格的に学ぼうとするものにとって不十分であるといわざるをえない．浅学の筆者があえてこの書物を著わした動機はここにある．

この書物の目的は，量子力学をかなり本格的に学ぼうとする学生に，量子力学の基本原理とそのものの考え方を明確に把握させ，またその理論を応用して

自ら計算ができるようにさせることである．量子力学のものの考え方やそこで利用される数学的方法は，古典物理学の考え方や方法とかなり異質のものであり，そのため専門家にとっては簡単な計算も，慣れない学生にとってはかなり難しいものである．そこで本書では，すべての演算過程を詳しく述べ，また70題の問題を随所に配置し，巻末にその詳解を与えることにより，量子力学が身につくように心掛けている．学部上級の学生を対象としているので，話を非相対論的量子力学に限り，相対論的理論には言及していない．一方，テキストを現代化するために，通常は余りふれていない，戦後に発展した散乱の一般論，Lamb シフトの理論，それに量子電磁気学の最大の応用であるレーザーの理論などについても解説している．なお，現在の学生が力学・電磁気学を国際単位系(MKSA 有理単位系)によって学んできていることを考慮して，本書では全巻を通して，この単位系を使用した．

本書は，筆者の講義のノートや，長年にわたって書きためたメモなどを中心として書き著わしたものである．そのため自己流のところも多く，そのことと著者の非才のために思いがけない誤りをおかしてはいないかと怖れるものである．また，それらのメモがどの文献にもとづくものであるか，記憶のはっきりしないものも多く，原著者の名をいちいちあげることができない．いまとなっては，多くの先達の業績にたいして一括して深い敬意を表わすほかに方法がない．なお，本書の執筆過程において，畏友今村勤教授から多大の貴重な助言を頂いたことを強調しておかなければならない．同氏の援助がなければ，このような形で本書を完成させることはできなかっただろう．ここに，改めて深く感謝の意を表わすものである．また，本書の出版に当っては，岩波書店の宮内久男氏に大変お世話になったことを，とくにここに記して深く謝意を述べる次第である．最後に，故内山龍雄先生の学恩を想い，本書を先生の霊に捧げる．

1991年1月

著　者

本書の構成と学び方

本書は次の8章から構成されている.

第1章は導入部であり，Einsteinの光の粒子説にはじまり，Schrödingerの方程式の発見，Bornによる波動関数の確率解釈にいたるまでの量子力学の形成過程の荒すじが説明される．また量子力学の問題の性格の一端を示すために，簡単な1次元の固有値問題と衝突問題が扱われる.

第2章は本書の中核となる部分であり，ここで量子力学の一般原理とその理論構造の骨格が示され，具体例として調和振動子の問題が詳しく論じられる．この章を読みおえた段階で，読者は量子力学のものの考え方を明確に把握できるはずである.

第3章では，第2章の一般論にもとづいて，中心力ポテンシャルのもとでの1粒子問題を解説する．ここで量子力学の基本的な課題である水素原子の固有値問題や，粒子のポテンシャルによる散乱の問題がとりあげられる.

第4章の主題はスピン角運動量である．前章で解説した角運動量の性質についてより深く考察する.

第5章は，量子力学でもっとも多く利用される近似法である摂動論の解説にあてられている.

第6章では多粒子系の理論がとりあげられ，まず同種粒子系の状態関数が粒子のいれかえに対して対称か反対称かのどちらかに限られることを説明する．また，摂動論の不適当な場合にもっとも有力な近似法となる変分法について述べ，これにもとづいて多電子系に対するHartree近似などに触れ，元素の周期律の量子力学的説明にいたる．この章の最後の節は多体系を扱うときのもっとも強力な武器である第2量子化の理論の詳しい解説にあてられている.

第7章では，すでに第3章と第5章でとりあげた散乱の理論を，S-行列の

考え方にもとづいてより一般的に論ずる．

最後の第 8 章では，光の粒子性を理解するための理論である量子電磁気学について解説する．この理論にもとづいて，Lamb シフトおよびレーザーの理論についても説明する．

“まえがき”にも述べたように，本書の対象は学部上級の学生である．したがって読者は，大学初年級程度の現代物理学に関する大よその知識をもっているものとしている．また，力学・電磁気学および数学に関しては，例えば，物理テキストシリーズ(岩波書店刊)の「力学」,「電磁気学」,「振動と波動」の程度の知識をもっていることが望ましい．数学に関しては，上記の書物以上の必要な知識は本書のなかで解説しているので，特別な予備知識を必要としない．

本書を学部上級用の教科書として利用するときには，やや程度が高いと考えられる

第 4 章§2　座標系の回転と角運動量

第 6 章§6　第 2 量子化

第 7 章　散乱の一般論

第 8 章　量子電磁気学

は割愛してもよいだろう．これらを除外すると，本文全体の大よそ 5 分の 3 ほどの分量となり，1 年間の教科課程として量的にも適当となろう．時間的に余裕のあるときには，それぞれの専門に応じて，省略した部分を適宜に追加すればよい．

なお随所にあげた問題は，量子力学をしっかり身につけるために必須のものなので，是非ともこれを学習することを希望してやまない．巻末に全問の詳解を与えているので，必要に応じて参照されれば幸いである．

本書によって量子力学を自習する場合には，第 1 回目では上にあげたやや程度の高い章や節をとばし，再読のときに精読されることをすすめる．

目　次

第1章

電子の粒子性と波動性

§1 光の粒子性と電子の波動性

物理学を学ぶとき，そこで用いられる物理量の大きさの程度について知っておくことは大切である．ここでは，量子力学の支配する原子的世界で現われる物理量の大きさの程度の感覚を把握するために，Compton 効果と Bohr の原子模型をとりあげて説明する．

(1) Compton 効果

19 世紀の最後の年に，Planck によってその扉を開かれた量子論は，1905 年の Einstein による光の粒子説によって，その歩みを確実なものとした．Einstein は，光が波動的性格とともに粒子的性格をも合わせもつと考えて，その粒子を**光子**(photon)と名づけ，角振動数 ω，波数 k の電磁波は，エネルギーと運動量がそれぞれ

$$E = \hbar\omega, \qquad p = \hbar k \tag{1.1}$$

で与えられる光子の集合体であるとした．ここで $\omega=ck$ であり，$c=2.9979\times 10^8$ m/s は真空中の光の速さ，また $\hbar=h/2\pi=1.0546\times10^{-34}$ J·s であり，h は Planck の定数である．(1.1)の関係から $E=cp$ である．これは静止質量 m，運動量 p の粒子の相対論的エネルギー $E=c\sqrt{p^2+m^2c^2}$ で $m=0$ としたものに一致している．

光の粒子性を実験により確立したのは，**Compton 効果**の発見であった．それは，原子に弱く束縛されているためにほとんど自由とみなせる電子に X 線を投射したとき，散乱された X 線の波長が入射 X 線の波長よりも長くなる現象である．入射光子のエネルギーと運動量を $\hbar\omega$, $\hbar\boldsymbol{k}$，散乱光子のそれらを $\hbar\omega'$, $\hbar\boldsymbol{k}'$，はじめ静止している電子が光子との衝突により動き出したときの運

動量を $\boldsymbol{p}$ とすると，エネルギー・運動量保存則により

$$mc^2+\hbar\omega = c\sqrt{p^2+m^2c^2}+\hbar\omega', \quad \hbar\boldsymbol{k} = \hbar\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{p} \tag{1.2}$$

が成立する．(1.2)から $\boldsymbol{p}$ を消去すると

$$\Delta\bar{\lambda} = \bar{\lambda}_c(1-\cos\theta) \tag{1.3}$$

をえる．ここで $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}'=kk'\cos\theta$ で，θ は光子の散乱角，また $\Delta\bar{\lambda}=\bar{\lambda}'-\bar{\lambda}$ は光子の波長の変化である．なお，通常の波長を λ としたとき，$\bar{\lambda}=1/k=\lambda/2\pi$ である．また

$$\bar{\lambda}_c = \hbar/mc = 3.862\times10^{-13}\,\mathrm{m} \tag{1.4}$$

を**Compton 波長**といい，これは基本的自然定数 $\hbar, c$ および電子の質量 m の組み合わせでつくられる長さの次元をもつ自然定数であり，それは電子的世界の長さの基本単位を与える．

問1　Compton の公式(1.3)を(1.2)から導出せよ．

(2) Bohr の原子模型

量子論が電子に適用されたのは，Bohr の原子模型が最初である．1913年，Bohr は，重い原子核のまわりを軽い電子が回転しているとする Rutherford の原子模型に量子論を適用して，水素原子の放射する光のスペクトルの説明に成功した．ここでは不必要な複雑さを避けるため，電子は陽子のまわりを円運動していると仮定する．このとき，電子の円運動として許されるのは，その角運動量に対する**量子条件**

$$mrv = n\hbar, \quad n = 1,2,3,\cdots \tag{1.5}$$

をみたす定常状態だけであり，その定常状態のエネルギー E_n の差が光子として放射されると仮定する．すなわち

$$\hbar\omega_0 = E_{n'}-E_n \quad (n'>n) \tag{1.6}$$

である．これを**振動数条件**という．なお，(1.5)で r は電子の陽子のまわりの軌道半径，v はその速さである．円運動をしている電子の運動方程式としては，古典力学の

$$m\frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r^2} \tag{1.7}$$

が成立すると仮定する．ここで $e(<0)$ は電子の電荷，右辺は電子・陽子間の

Coulomb 力である．(1.5)と(1.7)から v を消去すると，許される電子の軌道半径は $r_n=(\lambda\!\!\!^{-}_c/\alpha)n^2$ で与えられる．ここで

$$\alpha = e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar c = 1/137.036 \tag{1.8}$$

を**微細構造定数**という．これは自然定数 $\hbar, c$ および e の組み合わせでえられる無次元の定数で，電子と電磁場の相互作用の強さを示す重要な定数である．この α を用いると，原子的世界における物理量の大きさの程度を直観的に把握することができる．$n=1$ としたときの電子の軌道半径

$$a_0 = \lambda\!\!\!^{-}_c/\alpha = 5.29\times10^{-11}\,\mathrm{m} \tag{1.9}$$

を **Bohr 半径**といい，これは原子的世界の長さの規準を与える．一方，古典物理学で重要な役割を果した**古典電子半径** $r_e=e^2/4\pi\varepsilon_0 mc^2$ は，α を用いると $r_e=\lambda\!\!\!^{-}_c\alpha=2.82\times10^{-15}\,\mathrm{m}$ と表わされる．したがって，Bohr 半径，Compton 波長，古典電子半径の大きさの比は

$$a_0 : \lambda\!\!\!^{-}_c : r_e = \alpha^{-1} : 1 : \alpha = 137 : 1 : 1/137$$

で与えられる．

電子の軌道半径 r_n を(1.5)に代入すると，半径 r_n の軌道上の電子の速さは $v_n=\alpha c/n$ であり，Bohr 半径上の円軌道の電子の回転速度は光速の 1/137 の程度であることが分かる．したがって，電子がその円軌道を 1 回転する時間 $t_0=2\pi a_0/v_1=2\pi\lambda\!\!\!^{-}_c/c\alpha^2=1.5\times10^{-16}\,\mathrm{s}$ は，原子的世界での一つの時間単位を与える．第 8 章で述べるように，原子の励起状態の平均寿命の値は $\tau=10^{-8}\,\mathrm{s}$ の程度である．したがって，その間の電子の回転数は $\tau/t_0\sim10^8$ 回となる．つまり，原子における 1 年を t_0 とすると，励起状態の電子が，その基底状態に落ちるまでに約 1 億年もかかる．原子内電子からみれば，その励起状態はほとんど永久的に安定であるということである．

定常状態における電子のエネルギーは

$$E_n = mv_n{}^2/2-e^2/4\pi\varepsilon_0 r_n = -(mc^2/2)\alpha^2/n^2 \tag{1.10}$$

で与えられる．すなわち，水素原子内の電子の結合エネルギーは，$mc^2=0.51$ MeV の $(1/137)^2$ 倍の程度の大きさであり，とくに $n=1$ のときに，$E_{\mathrm{Ryd}}=|E_{n=1}|$ を **Rydberg エネルギー**といい，それは次のような色々な形で書くことができる．

$$E_{\mathrm{Ryd}} = (mc^2/2)\alpha^2 = e^2/8\pi\varepsilon_0 a_0 = (\hbar^2/2m)a_0{}^{-2} = 13.61\,\mathrm{eV}. \tag{1.11}$$

最後に，(1.6)の振動数条件より，定常状態 $E_{n'}$ から定常状態 E_n への転移に伴って放射される光子のエネルギーは

$$\hbar\omega_0 = E_{n'} - E_n = \frac{1}{2}mc^2\alpha^2\left[\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right] \qquad (n' > n) \qquad (1.12)$$

で与えられる．

問2　水素原子が運動しているとき，放射される光子のエネルギーは(1.12)とは少し異なる値になる．気体状の水素原子の速度分布は Maxwell 分布で与えられ，そのため放射される光の角振動数 ω もある幅をもつことになる．このスペクトル幅を Doppler 幅という．この角振動数 ω の拡がりの半値幅が

$$\Delta = 2\omega_0(2\log 2/\beta Mc^2)^{1/2}$$

で与えられることを示せ．ここで M は水素原子の質量，また $\beta = 1/k_B T$ で，k_B は Boltzmann 定数，T は水素原子気体の絶対温度であり，$\hbar\omega_0$ は水素原子が静止しているときに放射される(1.12)の光子のエネルギーである．

(3)　電子の波動性

Bohr は正体不明の量子条件(1.5)を仮定することにより，水素原子から出る光のスペクトルを見事に説明した．この量子条件の秘密をあばいたのが de Broglie である．Einstein によると，角振動数 ω，波長 $\lambda = 2\pi\lambda\!\!\!^{-}$ の光は，エネルギー $E = \hbar\omega$，運動量 $p = \hbar/\lambda\!\!\!^{-}$ をもつ光子の集合体であるという．1923年，de Broglie は，この関係を逆に読んで，エネルギー E，運動量 p をもつ電子は角振動数 $\omega = E/\hbar$，波長 $\lambda\!\!\!^{-} = \hbar/p$ の波動を伴うと考えた．すなわち，波動であると考えられていた光が粒子性をもつとともに，粒子であるとされていた電子も波動性をもつと考えた．この波動を**電子波**という．また，電子以外の陽子や中性子もまた波動性をもつとして，これらを一般に**物質波**という．

水素原子内で陽子を中心として半径 r の円運動をしている電子を，de Broglie のいう電子波であると考える．このときに，この円周上に分布する定常波を $\psi(\theta, t) = A\sin\omega t\cdot\cos(r\theta/\lambda\!\!\!^{-})$ としよう．ここで θ は陽子を中心とする角である．波動関数の1価性 $\psi(\theta+2\pi) = \psi(\theta)$ を仮定すると，$\cos(2\pi r/\lambda\!\!\!^{-}) = 1$ および $\sin(2\pi r/\lambda\!\!\!^{-}) = 0$ が要求される．したがって，$r/\lambda\!\!\!^{-} = n$ ($n = 1, 2, 3, \cdots$) でなければならない．これに Einstein-de Broglie の仮定 $\lambda\!\!\!^{-} = \hbar/p = \hbar/mv$ を代入すると，(1.5)に示した Bohr の量子条件がえられる．この条件をみたさない

ときには，振幅 $A=0$ となって，波動そのものが存在しえない．すなわち，Bohr の量子条件は，電子波が陽子のまわりで定常波をつくるための条件だったのである．

さて，Einstein-de Broglie の関係(1.1)を利用すると，粒子の速度 v と，それに伴う波動の群速度 v_g が一致することが示される．なぜなら

$$v = \partial E/\partial p = \partial \omega/\partial k = v_g$$

となるからである*．これに対して，波の位相速度は

$$v_p = \omega/k = E/p$$

で与えられる．光子の場合には，$E=cp$ であるから，$v=v_g=v_p=c$ となり，これらの速さはいずれも c である．ところが，自由電子の場合には，$E=p^2/2m$ であるから，$v=v_g=p/m$ であるのに対して，電子波の位相速度は $v_p=p/2m$ で与えられ，その値は電子の粒子としての速さの半分である．このように，電子の波動性を考えたとき，電子の速度という概念は一義的な意味をもたない．これに対して，Einstein-de Broglie の関係 $p=h/\lambda$ は，電子の運動量の値を決める一義的な方法を与えている．すなわち，電子波の波長 λ を測定することにより，$p=h/\lambda$ の関係によりただちに運動量 p の値を知ることができる．このとき，古典力学における運動量の定義式 $\boldsymbol{p}(t)\equiv m[\boldsymbol{r}(t+\Delta t)-\boldsymbol{r}(t)]/\Delta t$ は，これを $\boldsymbol{r}(t+\Delta t)=\boldsymbol{r}(t)+\boldsymbol{p}(t)\Delta t/m$ と書きかえて，時刻 t における粒子の位置の測定値 $\boldsymbol{r}(t)$ と，その時刻における運動量の測定値 $\boldsymbol{p}(t)$ から，次の時刻 $t+\Delta t$ における粒子の位置 $\boldsymbol{r}(t+\Delta t)$ を知るための運動法則と解釈されることになる．すなわち，Einstein-de Broglie の関係(1.1)を仮定するときに，速度 $\boldsymbol{v}$ よりも運動量 $\boldsymbol{p}$ のほうがより基本的な物理量とみなされることになる．この事情が，のちに量子力学が解析力学の正準形式にもとづいて構成される要因となるのである．

問 3　粒子がある境界面で屈折するとき，入射角を θ，屈折角を θ'，それぞれの領域での粒子の速さを v および v' とする．一方，この粒子を物質波とみなしたとき，それぞれの領域での位相速度を v_p および v_p' とする．このとき，屈折の法則 $\sin\theta/\sin\theta'=v'/v=v_p/v_p'$ が成立することを示せ．

---

*　外力 $\boldsymbol{F}$ による粒子の運動エネルギーの増量は，運動法則 $\Delta\boldsymbol{p}=\boldsymbol{F}\Delta t$ により，$\Delta E=\boldsymbol{F}\cdot\boldsymbol{v}\Delta t=\boldsymbol{v}\cdot\Delta\boldsymbol{p}$．これより $\boldsymbol{v}=\partial E/\partial\boldsymbol{p}$．この関係は相対論的系でも成立することに注意．

§2　Schrödinger の方程式

de Broglie は，粒子であると考えられていた電子が波動としての性質をも合わせもつことを明らかにした．それなら，その波動を規定する自然法則としての波動方程式が存在するはずである．1926年，この方程式を発見したのが Schrödinger である．角振動数 ω，波数 $\boldsymbol{k}$，振幅 a の平面波は

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = a\sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t) \tag{2.1}$$

で表わされる．しかしここでは，この平面波を複素数の形で

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = a\exp[i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t)] \tag{2.2}$$

と表現しておく．このように複素数を用いる理由は後に明らかになるが，いまは単に数学的な便宜上のものと了解しておいてよい．ここで自由電子の場合を考えて，(2.2)に(1.1)の関係を代入すると

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = a\exp[i\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}/\hbar - i(\boldsymbol{p}'^2/2m)t/\hbar] \tag{2.3}$$

となる．(2.3)で運動量にダッシをつけて $\boldsymbol{p}'$ としたのは，これが単なる数値であることを強調するためである．(2.2)の指数の ω と $\boldsymbol{k}$ は角振動数と波数を表わす数値である．したがって，(1.1)の関係で示される粒子のエネルギー E と運動量 $\boldsymbol{p}$ もまた単なる数値であって，それらは運動方程式の解として与えられるエネルギー $E=E(\boldsymbol{r}(t),\boldsymbol{p}(t))$ や運動量 $\boldsymbol{p}(t)$ のような力学量ではないことに注意しよう．また，(2.3)の波動関数が，電磁波のような通常の意味の波動を表わすものならば，そのエネルギーや運動量は，波の振幅 a の絶対値の2乗 $|a|^2$ に比例するはずである．ところが(2.3)の de Broglie 波では，エネルギーと運動量が指数に現われている．このことは，(2.3)で表わされる波動が，弾性波や電磁波とは別種の波動であることを示唆している．

de Broglie 波(2.3)のみたす波動方程式を求めるため，(2.3)を微分すると

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\boldsymbol{p}'^2\psi, \qquad -\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} = p_x'^2\psi$$

などがえられる．これらの右辺を比較すると，波動方程式として

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi \tag{2.4}$$

をえる．なお，$\triangle\equiv\partial^2/\partial x^2+\partial^2/\partial y^2+\partial^2/\partial z^2$ はラプラシアンである．

ここで(2.4)の方程式を別の観点から見直そう．質量 m の古典的粒子のエネルギー値 E は，古典的ハミルトニアン $H_c=(1/2m)[p_x{}^2(t)+p_y{}^2(t)+p_z{}^2(t)]$ を用いて

$$E=(1/2m)[p_x{}^2(t)+p_y{}^2(t)+p_z{}^2(t)] \tag{2.5}$$

と表わされる．(2.5)で

$$E\longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t},\quad p_x(t)\longrightarrow\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x},\quad p_y(t)\longrightarrow\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y},\quad p_z(t)\longrightarrow\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial z} \tag{2.6}$$

とおきかえて，右から ψ を作用させると(2.4)の波動方程式がえられる．さらに，ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ の作用のもとにある粒子を考えると，その系の古典的ハミルトニアンは

$$H_c=(1/2m)[p_x{}^2(t)+p_y{}^2(t)+p_z{}^2(t)]+V(\boldsymbol{r}(t))$$

で与えられる．ここで(2.6)のおきかえをすれば

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=H\psi \tag{2.7}$$

となる．ここで H は

$$H=-(\hbar^2/2m)\triangle+V(\boldsymbol{r}) \tag{2.8}$$

で与えられる演算子で，これをハミルトン演算子という．(2.7)の方程式を**Schrödinger の方程式**といい，この方程式こそ，古典力学における Newton の運動方程式に対応する量子力学における基本方程式である．

(2.6)のおきかえの操作を**量子化の手続き**という．この手続きで，粒子の速度ではなく運動量を用い，またその運動量を用いてエネルギーを表わすハミルトニアンを利用するところに，さきに述べた運動量の優先性が反映されていることに注意されたい．(2.6)の量子化の手続きが何を意味するかはいまの段階では全く不明であるが，この仮定の成否は，(2.7)の Schrödinger の方程式が実験事実を正しく説明するか否かにかかっている．第3章で詳しく述べるように，Schrödinger は，(2.7)を水素原子に適用し，これを解いて，その結論が Bohr の原子模型の与える結果と完全に一致することを示した．(2.6)のおきかえの物理的意味については，第2章で詳しく説明するので，なぜ(2.6)のような操作を行うのかという疑問への解答は後に残しておく．

§3　波動関数の確率解釈

ここで，(2.7)の波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ のもつ物理的意味を考えよう．そのためには，古典物理学における自然記述の方法を反省してみるとよい．古典力学では，粒子の位置 $\boldsymbol{r}$ と運動量 $\boldsymbol{p}$ を時間 t の関数として

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(t), \qquad \boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}(t) \tag{3.1}$$

で表わし，これにより粒子の運動は完全に記述される．これらの関数形を規定するのが運動方程式である．すなわち，物体の粒子としての性質は，任意の時刻 t における粒子の位置と運動量を与えることにより決定する．これに対して，3次元の空間内を伝播する波動，例えば電磁波は，空間内の任意の場所 $\boldsymbol{x}$ におけるベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ と電場の強さ $\boldsymbol{E}$ が時間 t とともにどのように変動するかという形で記述される．すなわち，電磁場は

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t), \qquad \boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}, t) \tag{3.2}$$

の関数形を与えることにより決められる．この関数形を規定するのが Maxwell の方程式である．このとき，(3.2)の右辺の独立変数 $\boldsymbol{x}$ は，運動法則により規定される粒子の位置ベクトル $\boldsymbol{r}(t)$ とは異なり，単に空間内の場所を指定するパラメーターにすぎない．電磁気学で研究の対象とされるのは，それぞれの場所 $\boldsymbol{x}$ における物理量 $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{E}$ である．そこで，(3.1)の粒子の位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ と運動量ベクトル $\boldsymbol{p}$ のそれぞれの3個の座標成分を $i=1, 2, 3$ の添字で表わし，さらにその添字を括弧のなかに書きこむと，

$$r_i = r(i, t), \qquad p_i = p(i, t) \tag{3.3}$$

となる．(3.2)と(3.3)を比較すると，(3.3)の粒子の自由度を表わすパラメーター i に対応するのが(3.2)の右辺の $\boldsymbol{x}$ であり，物理量 r_i と p_i に対応するのが $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{E}$ である．このとき，粒子の自由度を表わす i の数が3個であるのに対して，(3.2)のパラメーター $\boldsymbol{x}$ は3次元空間の全領域にわたる連続的な値をとる．すなわち，(3.2)で記述される電磁場は連続無限の自由度をもつ物理系である．電子波を記述する波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ の独立変数 $\boldsymbol{r}$ は，電磁場の場所を指定する独立変数 $\boldsymbol{x}$ と同じものだろうか．仮にそうとすれば，前にもちょっと述べたように，電磁波のエネルギー密度が $\boldsymbol{E}^2$ に比例するように，複素数 ψ の絶対値の2乗 $|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2$ をもって，場所 $\boldsymbol{r}$ における電子波の密度に比例する

量と解釈せざるをえない．事実，Schrödinger 自身は，電子は $|\psi|^2$ に比例する密度で拡がっている雲のかたまりのようなものと考えていた．

Schrödinger のこの考え方の成否を検討するために，次のような仮想的実験を考えてみよう．いま仮に1個の電子を箱のなかに閉じこめたとする．このとき，電子波 ψ は，箱のなかの全体に一様に拡がっているものとしよう．そこでこの箱のまんなかに“しきり”を挿入して，箱を左右に分割したとする．すると電子の波は箱の左右の部分に分裂するだろう．このようなことを繰り返せば，電子の波はいくらでも小さく分裂する．ところが，そのような電子の破片を観測したひとはいない．観測される電子はすべて完全な電子である．つまり，Schrödinger が解釈したように，$\psi(\boldsymbol{r}, t)$ をもって，ある場所 $\boldsymbol{r}$ における実在の波動と考えたのでは，電子の示す波動性は説明できても，肝心の電子の分割不能な素粒子としての性質を説明することはできない．

電子の波動関数の解釈に関するこの重大な困難を克服する道を開いたのは Born である．Born は極めて奇妙な考え方をとることにより，この困難を克服し，電子波に粒子的な解釈を与えることに成功した．すなわち Born は，電子波 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ は電磁波のような物理的実在ではなく，電子の存在確率を与える確率波であるとした．$|\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 d^3\boldsymbol{r}$ は電子波の密度ではなく，位置 $\boldsymbol{r}$ の近傍の微小体積 $d^3\boldsymbol{r}$ のなかに電子を発見する確率であると解釈することにより，電子の波動性と粒子性を統一的に理解することを可能にした．箱に閉じこめた電子の場合，Born の解釈によると次のようになる．はじめ電子を箱に閉じこめたとき，電子は確かにその箱のなかにあるから，箱のなかに電子を発見する確率は1である．このとき，箱の左右の各部分に電子が存在する確率はそれぞれ1/2である．ここで箱に“しきり”を入れて，それから箱の左側の部分の蓋を開いたとする．仮に電子が左側にはなかったとすれば，電子は確実に右側に存在する．つまりこのとき，電子が左側に存在する確率は0で，右側での存在確率は1である．電子の断片が各部分に発見されることは決してない．

この確率解釈に対して，量子力学の発見に最大の役割を果した de Broglie, Schrödinger および Einstein は強硬に反対した．例えば de Broglie はいう．いま仮に，箱に“しきり”を入れた後に，そのまま箱の左側の部分を大阪へ，右側の部分を東京に運ぶ．左右の箱をそのままにしておく限り，それぞれの箱の

部分に電子を発見する確率は1/2である．そこで，大阪の箱を開いたとする．このとき，大阪の箱のなかに電子が発見されたとすると，東京の箱には電子は存在しないことになる．つまり，大阪と東京の間にはいかなる情報伝達の可能性もないのに，大阪で蓋を開いた瞬間にその結果が遠く離れた東京での結果に影響を及ぼしたことになる．こんなことはありえないというのが de Broglie の反論である．これと本質的には同種の思考実験による反論としては，Schrödinger の猫の実験，もうすこし定量的な議論としては，Einstein-Podolsky-Rosen のパラドクスなどが有名である．ここで，誤解をおそれずにたとえ話をしよう．いま，A 君が入学試験を受けたとする．A 君の実力から判断すると，合否の確率は半々である．さて，入学試験が終了した．しかし，発表までの間，A 君には自分の合否は不明である．そして発表の瞬間に A 君は自分の合否を知ることができる．このとき，A 君の合否不明には二つの段階がある．それは入学試験の直前までの段階と，入学試験の終了時から発表までの間の段階である．入学試験の直前までの段階では，A 君の合否に関しては神様でもそれを知ることはできない．しかし，入学試験が終ったあとは，書かれた答案はすでに確定しているのであって，A 君自身は知らなくても，それを採点した教授は発表前にすでに結果を知っている．箱のなかの電子の実験でいえば，“しきり”を入れる前には，電子が左右のどちらの部分にあるのか誰も知りえない．知ることのできるのは，それぞれの部分における存在確率が1/2ずつであるということだけである．しかし，“しきり”を入れた瞬間に，電子がどちらの部分に存在するかは，人間が箱の蓋を開くか否かに関係なく決まってしまう．つまり，“しきり”を入れた瞬間に，箱全体に拡がっていた波動関数 ψ は，箱の左側か右側のどちらかに収縮して，別の波動関数に変わってしまうのである．そのあとで，箱の各部分をどこに運ぼうと，結果には何の影響もないのである．“しきり”を入れた瞬間に，どのようにして波動関数が収縮するのか，その機構に関して量子力学は何もいわない．ただそう仮定するだけである．“しきり”を挿入する過程での電子と“しきり”との相互作用を考慮することにより，波動関数の収縮の機構を明らかにしようとする試みがこれまでも多くのひとによってなされてきた．しかし，この問題は，“観測の問題”として，現在も未解決の問題として残されている．

波動関数 ψ が電磁波のような物理的に実在する波動を表わすものではないことは，電子が2個ある場合を考えればただちに了解することができる．2個の電子がポテンシャル $V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$ を通して相互作用をしているとき，その系のハミルトニアンは，古典力学では

$$H_c = \boldsymbol{p}_1^2/2m+\boldsymbol{p}_2^2/2m+V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) \tag{3.4}$$

で与えられる．これに対して(2.6)の量子化の手続きを適用すると，この2電子系の Schrödinger の方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_1-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_2+V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)\right]\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,t) \tag{3.5}$$

で与えられる．ここで $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ はそれぞれ電子の位置座標である．仮にこの波動関数 $\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,t)$ を電磁波 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ のような波動とみなすならば，それは6次元空間 $(x_1,y_1,z_1; x_2,y_2,z_2)$ における波動と解釈せざるをえない．したがって，電子が100万個あれば，300万次元の空間を考えて，その空間のなかの波動を考えることになる．これでは Schrödinger が本来その目的とした波動 ψ の直観的描像の維持は不可能になってしまう．これに対して Born の確率解釈をとるとき，電子が何個あろうとも，波動関数 ψ をあくまでも通常の3次元空間における確率波として理解することができる．すなわち，$|\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,t)|^2$ は時刻 t において，3次元空間 (x,y,z) のなかの $\boldsymbol{r}_1$ という位置に1番目の電子を，そして同時に $\boldsymbol{r}_2$ という位置に2番目の電子を発見する確率に比例する量であると解釈することができる．

このように，$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,t)$ のなかの $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ は，電磁場 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ の $\boldsymbol{x}$ のように単に**場所**を指定するパラメーターではなく，そこに電子という実体が存在する**位置**を表わしている．この節のはじめに強調したように，電子の粒子性は，その位置を指定する物理量 $\boldsymbol{r}$ によって表現される．一方，電子の波動性は関数 ψ によって表現されている．つまり，電子の粒子性 $\boldsymbol{r}$ と波動性 ψ を $\psi(\boldsymbol{r},t)$ の形で統合したのが Born の確率波である．このとき，古典力学では時間の関数であった位置 $\boldsymbol{r}(t)$ を単に変数 $\boldsymbol{r}$ とし，物理系の時間依存性を ψ の時間依存性に押しつけたのである．このような古典物理学とは全く異なる新しい自然記述の方法のもつ本当の意味については，第2章で明らかにされる．

波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ を確率波と解釈するなら，この波動関数で記述される電子

の存在確率の全空間にわたる積分値は

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\boldsymbol{r}, t)|^2 \mathrm{d}^3 r = 1 \tag{3.6}$$

でなければならない．なぜなら，電子は空間のどこかに確実に存在するはずだからである．このように，(3.6)の積分値を1に調節できるのは，ψ のみたす Schrödinger 方程式(2.7)が ψ に関する線形方程式だからである．この線形性のおかげで，ψ が(2.7)の解であれば，その定数倍もまた解になっている．この定数を適当に調節することにより，(3.6)の条件をみたさせることができるが，絶対値が1の位相因子 $e^{i\delta}$ の不定性は残される．ここで δ は任意の実数である．(3.6)の条件をみたす波動関数を規格化された波動関数という．しかし，(3.6)の左辺の積分値は，一般には時間 t の関数であり，時刻 t ではその値が1であっても，次の瞬間には別の値に変化してしまう可能性がある．しかしその心配は不要である．いま1電子系を考えると，(2.7)と(2.8)から

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + V(r)\right]\psi \tag{3.7}$$

である．そこで，(3.7)と ψ の複素共役量 ψ^* のみたす方程式を利用すると，ポテンシャル V を含む項は消えて

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) &= \frac{\partial\psi^*}{\partial t}\cdot\psi + \psi^*\cdot\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{\hbar}{2mi}[\triangle\psi^*\cdot\psi - \psi^*\cdot\triangle\psi] \\ &= -\frac{\hbar}{2mi}\nabla\cdot[\psi^*\cdot\nabla\psi - \nabla\psi^*\cdot\psi] \end{aligned} \tag{3.8}$$

となる．ここで $\nabla \equiv (\partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z)$ である．そこで

$$\begin{aligned} \rho(\boldsymbol{r}, t) &= \psi^*(\boldsymbol{r}, t)\psi(\boldsymbol{r}, t), \\ \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}, t) &= (\hbar/2mi)[\psi^*\cdot\nabla\psi - \nabla\psi^*\cdot\psi] \end{aligned} \tag{3.9}$$

と書くと，(3.8)は

$$\partial\rho/\partial t + \nabla\cdot\boldsymbol{j} = 0 \tag{3.10}$$

となる．これは，電磁気学における電荷保存則や流体力学における連続の方程式と同形の方程式である．そこで(3.9)の ρ を確率密度，$\boldsymbol{j}$ を確率の流れの密度と解釈すれば，(3.10)は**確率の保存則**を与える．すなわち，(3.10)を全空間にわたって積分すると，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}\rho\,\mathrm{d}^3r = -\int_{-\infty}^{\infty}\nabla\cdot\boldsymbol{j}\,\mathrm{d}^3r = -\int_S \boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{n}\,\mathrm{d}S \tag{3.11}$$

となる．したがって，無限遠方の空間表面 S から流出する確率の流れの正味の値が 0 のとき

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}^3r = 0 \tag{3.12}$$

である．すなわち，(3.11)の右辺が 0 のとき，時刻 t において(3.6)の条件をみたしていれば，任意の時刻で(3.6)が成立する．上の証明は，Schrödinger の方程式が(3.7)で与えられている 1 電子系のときにのみ正しいが，全確率がつねに 1 に保たれるために，より一般の場合に要求される条件がハミルトニアンのエルミート性である．これについては第 2 章で詳しく説明する．

以上の議論をまとめると，古典力学の運動方程式にかわる基本方程式としての Schrödinger の方程式と，そこに現われる波動関数 ψ に対する確率解釈によって，電子という実体の示す粒子的性格と波動的性格とを統一的に理解することができる．このとき，古典力学における粒子の運動状態が，時間 t の関数として $\boldsymbol{r}(t)$ と $\boldsymbol{p}(t)$ の形を与えることにより決定し，また電磁場の状態が時間 t と場所 $\boldsymbol{x}$ の関数として，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)$ と $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t)$ を与えることにより表わされるように，量子力学における電子の状態は，確率波 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ を与えることによって記述される．

§4　定常状態と境界条件

(1)　定常状態

§1 の(3)において電子波の考えを水素原子の円軌道に適用したとき，その定常波が安定に存在しえるのは，その波長が特定の条件をみたすときだけであった．この問題を Schrödinger の方程式にもとづいて扱うときには，その定常解を求める必要がある．定常波とは，波動が進行せず，その振幅が時間とともに変わる波である．すなわちそれは，位置変数 $\boldsymbol{r}$ と時間変数 t に関する部分が分離し

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = f(t)\phi(\boldsymbol{r}) \tag{4.1}$$

の形で表わされる波である．これを(2.7)の方程式に代入すると，

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}f(t)}{\mathrm{d}t}\Big/f(t)=H\phi(\boldsymbol{r})/\phi(\boldsymbol{r}). \tag{4.2}$$

左辺は時間 t だけの関数で，右辺は位置 $\boldsymbol{r}$ だけの関数であるから，(4.2)の等号が $\boldsymbol{r}, t$ の任意の値に対して成立するには，両辺がある定数 E に等しくなくてはならない．このとき

$$i\hbar\mathrm{d}f(t)/\mathrm{d}t=Ef(t),\qquad H\phi(\boldsymbol{r})=E\phi(\boldsymbol{r}). \tag{4.3}$$

(4.3)の第1式の解は $f(t)=f(0)\exp[-iEt/\hbar]$ である．一方，第2式は線形微分方程式であるから，その解は定数倍の不定性がある．そこで $f(0)$ を ϕ に吸収してしまうと，(4.1)は $\psi(\boldsymbol{r},t)=\phi(\boldsymbol{r})\exp[-iEt/\hbar]$ となる．これを(2.3)と比較すると，(4.3)の分離定数 E は電子のもつエネルギーの値であることが分かる．自由電子の場合には，そのエネルギーの値は $E=p'^2/2m$ で与えられ，これは任意の正または0の値をとる．ポテンシャル V の作用のもとでの電子のとるエネルギー値は，ある場合には自由電子のときと違って特別な値だけであることがすぐあとで示される．そこで，その許されるエネルギーの値に $E_1, E_2, \cdots, E_n, \cdots$ と番号づけをし，それらのエネルギーの値 E_i に対応する(4.3)の第2式の解を ϕ_i と書くと，(2.7)の方程式の定常解は

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\phi_i(\boldsymbol{r})\exp[-iE_it/\hbar],\qquad H\phi_i(\boldsymbol{r})=E_i\phi_i(\boldsymbol{r}) \tag{4.4}$$

で与えられる．この許されるエネルギーの値 E_i をハミルトニアン H の**固有値**，ϕ_i を H の**固有関数**または**固有状態**という．(4.4)の ψ はすべての E_i に対して(2.7)の解になっている．(2.7)は ψ に関する線形方程式であるから，(4.4)の解を任意の重み C_i をつけて重ね合わせた

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_i C_i\mathrm{e}^{-iE_it/\hbar}\phi_i(\boldsymbol{r}) \tag{4.5}$$

もまた(2.7)の解である．これが(2.7)の Schrödinger の方程式の一般解であり，定数 C_i は初期条件 $\psi(\boldsymbol{r},0)$ を与えることにより決定する．

(2)　境界条件

上に述べたように，Schrödinger 方程式の解を求めるには，(4.4)の第2式の固有値 E_i と固有関数 ϕ_i を求めなくてはならない．これを**固有値問題**といい，量子力学の中心課題の一つになる．(4.4)の第2式は ϕ_i に関する微分方程式であるから，その解を決めるには境界条件を与える必要がある．ここでは，その

境界条件について調べよう．

量子力学が形成される以前の Bohr の原子模型では，そこで仮定された量子条件は，電子が陽子に束縛されているときにだけ適用され，電子が太陽系の彗星のように双曲線または放物線軌道上を運動しているとき，量子論はその運動をどのように規制するのかが全く不明であった．しかし，Schrödinger の方程式が与えられているいまでは，エネルギーが負の値をとる束縛状態は，無限遠方で波動関数が 0 になる状態として，またエネルギーが正または 0 の値をとる双曲線および放物線型の運動に対応する状態は，無限遠方でも波動関数が消えない状態として問題を処理することができる．すなわち，電子の束縛状態は

$$\phi_i(\boldsymbol{r}\to\infty)\longrightarrow 0 \tag{4.6}$$

の条件をみたす状態である．

次に，粒子に作用するポテンシャル関数 V がある場所で不連続のとき，その場所で固有関数 ϕ_i のみたすべき条件を調べよう．簡単のため，ここでは 1 次元の体系を考える．このとき，Schrödinger の固有値方程式は

$$\frac{\mathrm{d}^2\phi(x)}{\mathrm{d}x^2}=-\frac{2m}{\hbar^2}[E-V(x)]\phi(x) \tag{4.7}$$

と表わされる．固有関数 $\phi(x)$ は，x のすべての点で(4.7)をみたし，かつ有界でなければならない．いま，$V(x)$ は x のいたるところで有限値をもつが，$x=a$ で不連続であるとしよう．すると，$\phi(x)$ は $x=a$ で連続であることが要求される．なぜなら，$\phi(x)$ が $x=a$ で不連続ならば，そこで $\mathrm{d}\phi/\mathrm{d}x$ と $\mathrm{d}^2\phi/\mathrm{d}x^2$ はともに無限大となる．そのとき(4.7)の右辺は有限なのに，左辺は無限大となり，$x=a$ で(4.7)はみたされないからである．また，$\phi(x)$ が $x=a$ で連続でも，$\mathrm{d}\phi/\mathrm{d}x$ がそこで不連続なら，$\mathrm{d}^2\phi/\mathrm{d}x^2$ は無限大となり，やはり(4.7)はみたされない．したがって，ポテンシャル $V(x)$ に有限なとびがあるとき，その不連続点で，$\phi(x)$ とその微係数 $\mathrm{d}\phi/\mathrm{d}x$ はともに連続でなければならない．

§5　1次元の問題

ここで前節で与えた境界条件のもとで，Schrödinger の固有値方程式の解が決まるからくりを明らかにし，また量子力学の問題の扱い方に少しでも慣れるために，1 次元の問題をとりあげよう．

(1) 1次元の井戸型ポテンシャルによる束縛状態

1次元空間内に1個の電子があり，原点Oを中心として，幅 $2a$ の井戸型ポテンシャル

$$V(x)=\begin{cases}0, & a \geqq x \geqq -a, \\ V_0>0, & |x|>a\end{cases} \tag{5.1}$$

によって束縛されているとする．このとき，電子のもつエネルギー値の E は $V_0>E>0$ の条件をみたしているものとする．この場合，解くべき方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\phi(x)=E\phi(x) \tag{5.2}$$

である．ここで問4にあるように，1次元の場合には同じ固有値に属する束縛状態の固有関数はただ1個に限られることを注意しておく．一般に同一の固有値をもつ固有関数が2個以上あるとき，その固有状態は**縮退**しているという．

方程式(5.2)を解くまえに，この方程式の空間的対称性を調べておく．(5.1)の $V(x)$ は，原点Oに関して左右対称であるから，$V(-x)=V(x)$ である．そこで，$x\to -x$ とおきかえると，(5.2)は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\right]\phi(-x)=E\phi(-x) \tag{5.3}$$

となる．すなわち，$\phi(x)$ が解ならば $\phi(-x)$ もまた同じ固有値 E に属する解である．しかし1次元系には縮退はないので，(5.3)の $\phi(-x)$ と(5.2)の $\phi(x)$ は同一の状態のはずである．したがって，$\phi(-x)$ は $\phi(x)$ の定数倍でなければならない．その定数を ε とすると，$\phi(-x)=\varepsilon\phi(x)$ となる．ここでもういちど空間座標の反転をすると，$\phi(x)=\varepsilon\phi(-x)$ である．これら2式を組み合わせると，$\varepsilon^2=1$，すなわち，$\varepsilon=\pm 1$ である．すなわち，(5.2)の方程式の解は

$$\phi(-x)=\pm\phi(x) \tag{5.4}$$

のどちらかの条件をみたしている．偶関数 $\phi(-x)=+\phi(x)$ のとき，この固有関数の**パリティー**(parity)は正，奇関数のとき，そのパリティーは負であるという．つまり，(5.2)の方程式の固有関数は，パリティーが正の $\phi^{(+)}(x)$ と，負の $\phi^{(-)}(x)$ の2種類に分類することができる．空間座標の反転に対する固有関数の偶奇性による分類は，3次元の場合にも可能である．

さて，$x>a$ の領域をI，$a\geqq x\geqq -a$ の領域をII，$x<-a$ の領域をIIIとする

と，領域IとIIIでは，(5.2)の方程式は

$$\mathrm{d}^2\phi/\mathrm{d}x^2 = (2m/\hbar^2)[V_0-E]\phi, \tag{5.5}$$

領域IIでは

$$\mathrm{d}^2\phi/\mathrm{d}x^2 = -(2m/\hbar^2)E\phi. \tag{5.6}$$

(5.5)と(5.6)を解くに当って，はじめパリティーが正のときを考えよう．このとき，$\phi^{(+)}$は偶関数であるから，それぞれの領域での一般解は，定数A, BおよびB'を用いて

$$\begin{aligned}\phi_{\mathrm{I}}^{(+)}(x) &= B\mathrm{e}^{-\beta x}+B'\mathrm{e}^{\beta x},\\ \phi_{\mathrm{II}}^{(+)}(x) &= A\cos\alpha x,\\ \phi_{\mathrm{III}}^{(+)}(x) &= B\mathrm{e}^{\beta x}+B'\mathrm{e}^{-\beta x}\end{aligned} \tag{5.7}$$

で与えられる．ここで$\beta=\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$，$\alpha=\sqrt{2mE/\hbar^2}$とおいた．(4.6)の束縛状態に対する条件により，$x\to\pm\infty$で固有関数は0であるから，(5.7)で$B'=0$である．また，$x=+a$のポテンシャルの不連続点で，$\phi^{(+)}$と$\mathrm{d}\phi^{(+)}/\mathrm{d}x$の連続性が要求されるから

$$B\mathrm{e}^{-\beta a} = A\cos\alpha a, \qquad B\beta\mathrm{e}^{-\beta a} = A\alpha\sin\alpha a \tag{5.8}$$

である．$x=-a$における条件も(5.8)で与えられる．(5.8)の未定定数AとBのうちの1個は，全波動関数の規格化の条件

$$\int_a^\infty|\phi_{\mathrm{I}}^{(+)}(x)|^2\mathrm{d}x+\int_{-a}^a|\phi_{\mathrm{II}}^{(+)}(x)|^2\mathrm{d}x+\int_{-\infty}^{-a}|\phi_{\mathrm{III}}^{(+)}(x)|^2\mathrm{d}x = 1 \tag{5.9}$$

により決まる．したがって，残りの1個の定数に対して(5.8)の2個の条件が要求され，一般には(5.8)は解をもたない．そして，解があるとすれば，それはEが特定の値をもつときだけである．これが，粒子のとるエネルギーの値，すなわちエネルギー固有値が離散的になる理由である．さきのαとβの定義より，$\alpha^2+\beta^2=2mV_0/\hbar^2$であり，また(5.8)から，$\beta=\alpha\tan\alpha a$である．ここでさらに，$\xi=\alpha a>0$，$\eta=\beta a>0$とおくと，$\xi$と$\eta$の正値に対する超越方程式

$$\xi^2+\eta^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2, \qquad \eta = \xi\tan\xi \tag{5.10}$$

がえられる．この連立方程式の解は，(5.10)の2個の関数のグラフを描いて，その交点を求めることによりえられる．$(2mV_0a^2/\hbar^2)$が小さいときは，解は1個に限られ，少し大きくなると2個の解が存在する．こうしてえられたそれぞれのエネルギー固有値を(5.8)に代入し，(5.9)の条件のもとでAとBを決め

れば，(5.7)の固有関数が求められる．

次にパリティーが負で，奇関数のとき，一般解はそれぞれの領域で

$$\phi_{\mathrm{I}}^{(-)}(x) = B\,\mathrm{e}^{-\beta x}, \quad \phi_{\mathrm{II}}^{(-)}(x) = A\sin\alpha x, \quad \phi_{\mathrm{III}}^{(-)}(x) = -B\,\mathrm{e}^{\beta x} \tag{5.11}$$

で与えられる．$x=\pm a$ における固有関数とその微係数の連続性の条件より

$$B\,\mathrm{e}^{-\beta a} = A\sin\alpha a, \quad -B\beta\mathrm{e}^{-\beta a} = A\alpha\cos\alpha a \tag{5.12}$$

が要求され，この場合には(5.10)のかわりに

$$\xi^2+\eta^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2, \quad \eta = -\xi\cot\xi \tag{5.13}$$

により，エネルギー固有値 E が決まる．

問4　1次元系の束縛状態には縮退がないことを示せ．

問5　(5.10)と(5.13)で $(2mV_0a^2/\hbar^2)$ を1および12としたときのエネルギー固有値を調べよ．

(2)　1次元の障壁との衝突問題

いま，$x<0$ の領域Iにある質量 m の粒子がエネルギー E をもって $a\geqq x\geqq 0$ の領域IIの高さ $V_0(>0)$ のポテンシャルの障壁に向かって衝突するとする．古典力学の場合には，E の値が障壁の高さ V_0 よりも小さいとき，粒子は障壁の前面で反射するだけで，ポテンシャルの壁を乗りこえて，$x>a$ の領域IIIに入ることは不可能である．ところが量子力学では，粒子は波動性をもつために，この障壁を乗りこえて領域IIIに浸み出す可能性がある．これを**トンネル効果**という．束縛状態の場合と異なり，いまの場合には入射粒子のエネルギーには任意の正の値を与えることができ，また，衝突前の粒子は $x<0$ の無限遠方から入射し，衝突後には $x\gtrless 0$ の無限遠方にとび去るので，粒子の波動関数は無限遠方でも0にならない．したがってこのとき，波動関数を(3.6)のように規格化することはできない．しかしこの種の問題で意味をもつのは，入射粒子の存在確率に対する反射粒子と透過粒子の相対確率であって，(3.6)の規格化条件をみたす絶対確率ではない．したがって，(3.6)の条件を要求する必要はない．

領域IとIIIでのSchrödingerの方程式は

$$-(\hbar^2/2m)\mathrm{d}^2\phi/\mathrm{d}x^2 = E\phi \tag{5.14}$$

で与えられる．ここで $k=p/\hbar=\sqrt{2mE/\hbar^2}$ と書き，(5.14)の解として次の形のものを仮定する．

$$\phi_{\mathrm{I}}(x) = A\,\mathrm{e}^{ikx}+B\,\mathrm{e}^{-ikx}, \qquad \phi_{\mathrm{III}}(x) = C\,\mathrm{e}^{ikx}. \tag{5.15}$$

ここで A, B および C は未定の定数である．これらの定数の意味を調べるため，(5.15)を(3.9)の確率の流れの密度に代入すると

$$i_x(x) = v(|A|^2-|B|^2), \qquad i_x(x) = v|C|^2 \tag{5.16}$$

となる．ここで $v=\partial E/\partial p=p/m=\hbar k/m$ を用いた．(5.16)から，A, B および C は，それぞれ入射波，反射波および透過波の相対確率の振幅と解釈することができる．このとき物理的に意味があるのは，反射率 $|B|^2/|A|^2$ と透過率 $|C|^2/|A|^2$ であって，$|A|^2$ などの大きさ自体は問題にならない．

はじめ，入射粒子のエネルギーが大きく，$E>V_0$ のときを考えよう．このとき，ポテンシャルのある領域IIで

$$\mathrm{d}^2\phi/\mathrm{d}x^2 = -[2m(E-V_0)/\hbar^2]\phi \tag{5.17}$$

が成立する．ここで $\alpha=\sqrt{2m(E-V_0)/\hbar^2}>0$ とおくと，(5.17)の一般解は，未定の定数 F と G を用いて

$$\phi_{\mathrm{II}}(x) = F\,\mathrm{e}^{i\alpha x}+G\,\mathrm{e}^{-i\alpha x} \tag{5.18}$$

と表わされる．$x=0$ と $x=a$ のポテンシャルの不連続点で，波動関数とその微係数は連続である．このとき，5個の未定定数 A, B, C, F および G に対して，$x=0$ での2個

$$A+B = F+G, \qquad ik(A-B) = i\alpha(F-G) \tag{5.19}$$

と，$x=a$ での2個

$$C\,\mathrm{e}^{ika} = F\,\mathrm{e}^{i\alpha a}+G\,\mathrm{e}^{-i\alpha a}, \qquad ikC\,\mathrm{e}^{ika} = i\alpha(F\,\mathrm{e}^{i\alpha a}-G\,\mathrm{e}^{-i\alpha a}) \tag{5.20}$$

の合計4個の条件が要求される．しかし，いま必要なのは，入射波の振幅 A に対する相対確率であるから，A は任意に選んでよい．(5.19)と(5.20)は4個の未定定数に対して4個の条件を与えている．したがってこのとき，任意の E の正の値に対して(5.19)と(5.20)の連立方程式の解があり，束縛状態のときのような E に対する制限条件は要求されない．これが入射粒子のエネルギーを自由に選べる理由である．

さて，(5.19)と(5.20)から F と G を消去すると，やや面倒ではあるけれど全く初等的な計算により

$$\frac{B}{A}=\frac{(k^2-\alpha^2)(1-\mathrm{e}^{2i\alpha a})}{(k+\alpha)^2-(k-\alpha)^2\mathrm{e}^{2i\alpha a}}, \qquad \frac{C}{A}=\frac{4k\alpha\mathrm{e}^{i(\alpha-k)a}}{(k+\alpha)^2-(k-\alpha)^2\mathrm{e}^{2i\alpha a}}$$

となる．これより，粒子の反射率および透過率として

$$\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left[1+\frac{4(k\alpha)^2}{(k^2-\alpha^2)^2\sin^2\alpha a}\right]^{-1}, \qquad \left|\frac{C}{A}\right|^2=\left[1+\frac{(k^2-\alpha^2)^2\sin^2\alpha a}{4(k\alpha)^2}\right]^{-1} \tag{5.21}$$

がえられる．このとき，相対確率の保存則

$$|B/A|^2+|C/A|^2=1 \tag{5.22}$$

が成立していることに注意しよう．なお，(5.21)で粒子の入射エネルギーが $\alpha a=n\pi\ (n=1,2,\cdots)$ の条件をみたしているとき，$|B/A|^2=0$，$|C/A|^2=1$ となり，入射波は反射することなく完全透過をする．

次に，入射エネルギーがポテンシャルの高さ V_0 よりも小さく，$V_0>E$ のときを考える．このときは，$\beta=\sqrt{2m(V_0-E)/\hbar^2}$ とおいて，(5.21)で $\alpha\to i\beta$ のおきかえをすればよい．すると

$$\left|\frac{B}{A}\right|^2=\left[1+\frac{4(k\beta)^2}{(k^2+\beta^2)^2\sinh^2\beta a}\right]^{-1}, \qquad \left|\frac{C}{A}\right|^2=\left[1+\frac{(k^2+\beta^2)^2\sinh^2\beta a}{4(k\beta)^2}\right]^{-1} \tag{5.23}$$

となる．

問6　質量 m の粒子がエネルギー E をもって，$V(x)$ が $x<0$ で $-V_0\ (V_0>0)$，$x>0$ で0のポテンシャルに向かって，x の負の側から入射するとき，粒子の反射率と透過率を，$0>E>-V_0$ と $E>0$ の場合について求めよ．

第2章

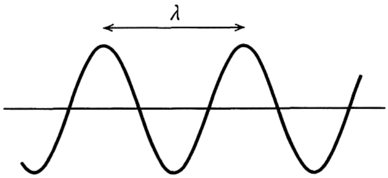
量子力学の一般原理

§1　重ね合わせの原理

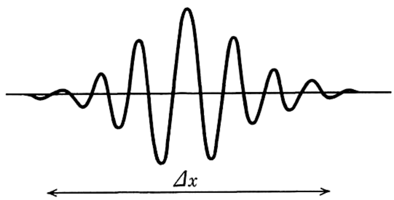
(1)　量子力学の成立

第1章に述べた de Broglie と Schrödinger による量子力学の発見のすこしまえに，Heisenberg はそれとは全く別の考え方にもとづいて，**行列力学**といわれる理論を提唱した．この理論からえられる結果が，Schrödinger の理論による結論とつねに一致することから，1926年，Schrödinger は，これらの両理論が一方は英語で，他方は日本語で書かれた同じ小説のようなものであり，その外見の相違にもかかわらず，それらの物理的内容は全く同等であることを明らかにした．さらに Dirac は，それらの両理論を特殊な場合として包含する一般理論をつくり，ここに量子力学の体系が完成する．この章の目的は，この量子力学の体系の一般原理を明らかにすることである．

古典力学では，粒子の位置 $\boldsymbol{r}(t)$ と運動量 $\boldsymbol{p}(t)$ を初期条件 $\boldsymbol{r}(0)$ および $\boldsymbol{p}(0)$ を与えることにより決定する．このとき，初期条件としての $\boldsymbol{r}(0)$ と $\boldsymbol{p}(0)$ を同時に決定できることを自明のこととしている．ところが量子力学では，粒子が波動性をもつために，これが不可能になる．すなわち，量子力学的粒子が一定の運動量 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ をもつ図 2.1(a)のような平面波で記述されているとき，その粒子の位置は全く不明である．一方，そのような平面波を重ね合わせて図 2.1(b)のような波束をつくり，その波動関数の拡がっている領域を Δx の範囲に限ったとき，領域 Δx のなかに含まれる波の数には ±1 個程度の不確定さがつねに伴っている．領域 Δx の範囲に含まれる波の数は $\Delta x/\lambda=(k/2\pi)\Delta x$ で与えられるから，波の数の不確定さは $(\Delta k/2\pi)\Delta x\sim 1$ である．この不確定性は，量子力学的な波に限らず，すべての波動のもつ性質である．ところがこれに定数



(a)　平面波



(b)　波　束

図 2.1　波束の波数の不確定性

$\hbar$ を掛けて，Einstein-de Broglie の関係を利用すると，事態は一変する．すなわちこのとき，上の不確定性は $\Delta p \Delta x \sim h$ となる．この関係は，粒子の運動量とその位置の不確定さを同時に0にすることが不可能であることを示している．これが **Heisenberg の不確定性関係**である．この不確定性のために，量子力学では初期条件として粒子の位置 $\boldsymbol{r}(0)$ と運動量 $\boldsymbol{p}(0)$ に同時に確定値を与えることは不可能になる．そのために，これらの初期条件の関数である時刻 t における粒子の位置 $\boldsymbol{r}(t\,;\,\boldsymbol{r}(0), \boldsymbol{p}(0))$ は正確には決まらない．ここに Born の確率解釈がはいりこんでくる原因がある．そこで量子力学では，まず第1に，ある時刻における体系の状態をどのようにして決めるかという，古典物理学ではほとんど自明であった問題が提起されることになる．その次に第2の問題として，そのようにして決められた状態の時間的発展を記述するための運動法則がとりあげられることになる．

(2)　離散固有値

ある物理的体系を記述する任意の物理量を F とする．F は，具体的には粒子の位置，運動量，角運動量およびエネルギーなどの力学量のどれかである．またこれからは，粒子の位置を $\boldsymbol{r}$ のかわりに $\boldsymbol{q}$ と書くことにする．第1章で

述べたように，量子力学は，粒子の速度よりも運動量 $\boldsymbol{p}$ を優先する正準形式の理論にもとづいて構成されていて，そこでは一般に独立な正準変数として $\boldsymbol{q}$ と $\boldsymbol{p}$ を用いるからである．また以下では，記号の繁雑さを避けるため 1 粒子系を用いて話を進めるが，これを多粒子系に一般化するのはほとんど自明である．また，$\boldsymbol{q}$ と $\boldsymbol{p}$ の 3 個の座標成分をまとめて，それらをそれぞれ q および p と書くことにする．

さて，古典物理学における物理量 $F=F(q(t), p(t))$ を $\boldsymbol{c}$ **数**(classical number)という．これを量子力学的な量に移すには，第 1 章(2.6)の手続きにしたがって，$F=F(q, (\hbar/i)\partial/\partial q)$ とすればよい．このような量子力学的演算子を一般に $\boldsymbol{q}$ **数**(quantum number)という．ここである関数 $\phi(q)$ をとって，これに演算子 F を作用させて，新しい関数 $F\phi(q)$ をつくったとする．このとき，$\phi(q)$ がある特別な関数のとき，$F\phi(q)$ がもとの関数 $\phi(q)$ そのものに比例することがある．その比例定数を f とすると，$F\phi(q)=f\phi(q)$ である．一般にこのような性質をもつ関数はただ 1 個とは限られず数多く存在する．そこでこれらの関数を区別するために，添字 n をつけて

$$F\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\phi_n(q) = f_n\phi_n(q) \tag{1.1}$$

と書くことにする．(1.1)をみたす関数 $\phi_n(q)$ と定数 f_n を，それぞれ演算子 F の**固有関数**および**固有値**という．また，これらを区別する添字 n を**量子数**という．ここでは，量子数 n は離散的な数値で表わされると仮定するが，一般にはそれは連続的な値をとることもある．なお，同一の固有値 f_n に属する固有関数は 1 個だけとは限らず，m 個の固有関数 $\phi_{n,\alpha}(q)\,(\alpha=1, 2, \cdots, m)$ がみな同じ固有値 f_n に属することがある．このとき，固有関数 $\phi_{n,\alpha}$ は m 重に**縮退**しているという．縮退のあるときや，連続固有値の場合については後に述べることにして，ここでは縮退のない離散固有値の場合に話を制限する．なお，演算子 F が物理量を表わすとき，その固有値 f_n は実数であることが要求されるが，そうであるために要求される演算子 F の性質などについては，後に詳しく述べる．

ここでまず，次のように仮定する．

仮定I　(1.1)の方程式の解としてえられた固有状態において，F に対応する物理量の値を測定すると，その測定値はかならず実数値 f_n である．▌

この仮定は，量子力学の基本原理の一つである．また体系が(1.1)の固有状態 $\phi_n(q)$ にあるとき，その粒子の位置を測定すると，微小領域 $\mathrm{d}q$ 内にその粒子を発見する確率が $|\phi_n(q)|^2\mathrm{d}q$ で与えられるとするのが，Born の確率解釈である．粒子は空間内のどこかにかならず存在するから

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_n(q)|^2\, \mathrm{d}q = 1 \tag{1.2}$$

である．なお，ここで3次元空間内の1粒子の場合には，$\mathrm{d}q \to \mathrm{d}^3q$ とすべきものである．(1.2)の条件をみたす固有関数 $\phi_n(q)$ を規格化された固有関数という．固有関数を規格化することはいつでもできる．なぜなら，(1.1)は ϕ_n に関する線形の方程式であり，ϕ_n が解ならばその定数倍も解となっているからである．

いま考えている体系の状態は，F の固有状態 $\phi_n(q)$ のどれかであるとはかぎらない．そこで任意の複素数のセット $\{a_n\}$ をとって，これを重みとして $\phi_n(q)$ を重ね合わせて，新しい状態

$$\psi(q) = \sum_n a_n \phi_n(q) \tag{1.3}$$

をつくったとする．どのような状態にあろうと，粒子は空間内のどこかに存在するから，(1.3)で表わされる状態 $\psi(q)$ もまた，(1.2)と同様に

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(q)|^2\, \mathrm{d}q = 1 \tag{1.4}$$

の条件をみたしていなければならない．(1.3)によって構成された状態 $\psi(q)$ において，さきの物理量 F を測定したら，その測定値はどのような値になるだろうか．ここで量子力学は，次の重要な仮定をする．

仮定II　重ね合わせの原理

状態 $\psi(q)$ のもとで，物理量 F を測定したとき，えられる測定値は(1.1)の固有値 f_n のどれかであり，それらの値の中間の値，例えば $(f_1+f_2)/2$ のよ

うな値がえられることは絶対にない．そして，その測定値として，すべての固有値のセット$\{f_n\}$のなかのどれかひとつの値f_nをえた瞬間に，これまでの状態$\psi(q)$はFの固有値f_nに属する固有状態$\phi_n(q)$に突然転移する．この状態の転移は全く非因果的なものであり，その転移の途中の過程を力学的法則によって追跡することはできない．そして，状態$\psi(q)$から状態$\phi_n(q)$への転移確率は，(1.3)の展開係数a_nの絶対値の2乗$|a_n|^2$で与えられる．▌

第1章でも述べたように，量子力学の創始者のひとりであるEinsteinは「神がサイコロを振るようなことをするはずがない」といって，上の考え方に強硬に反対した．しかし，現代の物理学者のほとんど全部が，上の仮定を肯定している．それでもなお，ここに量子力学のもっとも深刻な問題が残されていることは事実である．

ここで，重ね合わせの原理を少し別の観点から調べよう．ある与えられた任意の状態$\psi(q)$において，物理量Fを測定したとき，その測定値がどの値になるかは分からないが，すべての可能な固有値のセット$\{f_n\}$のなかのどれかになることは確かである．これを言いかえれば，任意の状態関数$\psi(q)$はFのすべての固有関数$\phi_n(q)$の重ね合わせで表わされるべきであることを意味する．これを数学の言葉で表現すれば，任意関数$\psi(q)$が(1.3)のように展開できるということである．このように，任意の関数を展開できる固有関数の全体$\{\phi_n\}$を**完全系**という．したがって重ね合わせの原理がみたされるためには，物理量を表わす演算子Fは，その固有値が実数であり，かつその固有関数系は完全系を構成していなくてはならない．これらの条件をみたす演算子を，とくに**オブザーバブル**(観測可能量)という．ある演算子がオブザーバブルであるか否かの厳密な数学的証明を与えることは，一般に非常に難しいが，多くの場合その正否は物理的直観にもとづいて判断することができる．状態$\psi(q)$において物理量Fを測定したとき，えられる値はすべての可能な固有値のうちのどれかであるから，それらの値をえる確率$|a_n|^2$に関して

$$\sum_n |a_n|^2 = 1 \tag{1.5}$$

が成立していなくてはならない．(1.4)と(1.5)から

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(q)\psi(q)\mathrm{d}q = \sum_n a_n^* a_n = 1 \tag{1.6}$$

である．(1.3)の複素共役をとり，(1.6)の左辺に代入すると

$$\sum_n a_n^*\int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(q)\psi(q)\mathrm{d}q = \sum_n a_n^* a_n$$

となる．この両辺を比較すると

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(q)\psi(q)\mathrm{d}q \tag{1.7}$$

である．この表式は，状態関数 $\psi(q)$ が与えられているとき，状態 $\phi_n(q)$ に系を発見する確率 $|a_n|^2$ を求める方法を与える．この a_n を一般に**確率振幅**という．(1.3)を(1.7)の右辺に代入すると

$$a_n = \sum_m a_m\int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(q)\phi_m(q)\mathrm{d}q$$

となるから，両辺が矛盾しないためには

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(q)\phi_m(q)\mathrm{d}q = \delta_{n,m} \tag{1.8}$$

でなければならない．ここで右辺の $\delta_{n,m}$ は **Kronecker のデルタ**といわれる記号で，それは $n=m$ のとき1，$n\neq m$ のとき0である．(1.8)の関係を固有関数 ϕ_n の**直交規格化性**という．なお，(1.7)で $\psi(q)=\phi_m(q)$ ととると

$$a_n = \int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(q)\phi_m(q)\mathrm{d}q = \delta_{n,m}$$

となる．すなわち，物理量 F の固有状態 ϕ_m において，その同じ F を測定したとき，$n=m$ のとき $a_m=1$，$|a_m|^2=1$ であり，$n\neq m$ のとき，$a_n=0$，$|a_n|^2=0$ である．このことは，仮定 II の重ね合わせの原理が，さきの仮定 I と矛盾しないことを示している．

状態 $\psi(q)$ において物理量 F を測定したとき，測定値として f_n をえる確率が $|a_n|^2$ で与えられるのであれば，同じ状態 $\psi(q)$ にある多くの全く同じ体系で，それぞれ同じ物理量 F を測定したとき，それらの測定値の平均値 $\bar{F}$ は

$$\bar{F} = \sum_n f_n|a_n|^2 \tag{1.9}$$

で与えられるはずである．平均値 $\bar{F}$ を確率論の言葉を用いて**期待値**ともいう．(1.9)の表式を用いて，物理量 F の期待値を求めるには，F の固有値の全体 $\{f_n\}$ と確率振幅 a_n のすべてを知っておく必要がある．ところが実は，期待値 $\bar{F}$ を知るには，いま考えている状態を表わす関数 $\psi(q)$ が分かっていさえすればよい．なぜなら，(1.1), (1.3)および(1.8)から

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(q)F\psi(q)\mathrm{d}q &= \sum_{n,m}a_n^*a_m\int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(q)F\phi_m(q)\mathrm{d}q \\ &= \sum_{m,n}a_n^*a_mf_m\int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(q)\phi_m(q)\mathrm{d}q \\ &= \sum_{m,n}a_n^*a_mf_m\delta_{n,m} = \sum_n f_n|a_n|^2\end{aligned}$$

となるからである．したがって，物理量 F の状態 $\psi(q)$ における期待値は

$$\bar{F} = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(q)F\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q)\mathrm{d}q \tag{1.10}$$

で与えられる．例えば，粒子の位置，運動量，エネルギーの期待値は，それぞれ

$$\begin{aligned}\bar{\boldsymbol{r}} &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\boldsymbol{r}\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r, \\ \bar{\boldsymbol{p}} &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\frac{\hbar}{i}\nabla\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r, \\ \bar{E} &= \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})H\left(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r\end{aligned} \tag{1.11}$$

で与えられ，状態関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ が分かっていれば，(1.11)の右辺の積分を実行することにより，その状態におけるそれぞれの物理量の期待値を求めることができる．

物理量 F がオブザーバブルであるための条件の一つは，その固有値 f_n が実数値であることであった．したがって(1.9)より，オブザーバブルの期待値 $\bar{F}$ もまた実数でなければならない．それでは，その期待値が実数であるために，演算子 F にはどのような条件が要求されるだろうか．それをみるために，(1.10)の複素共役をとると

$$\bar{F}^* = \int_{-\infty}^{\infty}(F\psi(q))^*\psi(q)\mathrm{d}q \tag{1.12}$$

である．したがって，$\bar{F}$ が実数であるためには

$$\int_{-\infty}^{\infty}(F\psi(q))^*\psi(q)\mathrm{d}q = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(q)F\psi(q)\mathrm{d}q \tag{1.13}$$

が成立しなければならない．(1.13)が成立するとき，固有値f_n自身も実数である．なぜなら，(1.13)で$\psi(q)=\phi_n(q)$と選ぶと，$F\phi_n=f_n\phi_n$．これより$(F\phi_n)^*=f_n^*\phi_n^*$である．これらを(1.13)に代入すれば，$f_n^*=f_n$となるからである．

一般に任意の2個の演算子AとBをとったとき，これらの演算子が任意の関数$\psi_1(q)$と$\psi_2(q)$に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty}(A\psi_1(q))^*\psi_2(q)\mathrm{d}q = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*(q)B\psi_2(q)\mathrm{d}q \tag{1.14}$$

の関係をみたすとき，Bを$A^\dagger$と書き，これをAに対する**エルミート共役な演算子**という．すなわち

$$\int_{-\infty}^{\infty}(A\psi_1)^*\psi_2\mathrm{d}q = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*A^\dagger\psi_2\mathrm{d}q \tag{1.15}$$

である．(1.15)でとくに$A^\dagger=A$のとき，Aを**エルミート演算子**という．したがって，演算子Fがエルミート演算子であるための条件は

$$\int_{-\infty}^{\infty}(F\psi_1)^*\psi_2\mathrm{d}q = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*F\psi_2\mathrm{d}q \tag{1.16}$$

で表わされる．(1.16)で$\psi=\psi_1=\psi_2$とすると(1.13)をえる．すなわち，(1.16)の条件は，演算子Fがエルミートで，その期待値と固有値が実数であるための必要かつ十分な条件である．また，$\psi_1=\phi_m$，$\psi_2=\phi_n$と選んで(1.1)を用い，f_nが実数であることに注意すると，(1.16)から

$$(f_m-f_n)\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m^*\phi_n\mathrm{d}q = 0$$

がえられる．したがって，$f_m\neq f_n$のとき

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m^*(q)\phi_n(q)\mathrm{d}q = 0 \tag{1.17}$$

である．すなわち，エルミート演算子の異なる固有値に属する固有関数は直交する．

(1.16)で$F=q$とおいたとき，(1.16)の等号が成立することはほとんど自明

である．したがって，実変数 $\boldsymbol{r}$ で表わされる位置演算子はエルミートである．運動量演算子 $\boldsymbol{p}=(\hbar/i)\nabla$ の場合には，部分積分により

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi_1\right)^*\psi_2\mathrm{d}^3r = -\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*\psi_2\mathrm{d}y\mathrm{d}z\Big|_{x=-\infty}^{x=+\infty}+\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1^*(\boldsymbol{r})\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi_2(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r$$

となり，右辺の第1項の $x=\pm\infty$ の面上の積分値の差が0のとき，運動量演算子 $(\hbar/i)\partial/\partial x$ はエルミートである．$x=\pm\infty$ で状態関数自身が0であれば，上の条件はもちろんみたされるが，そうでなくても $x=\pm\infty$ における積分値の差さえ0であればよいことに注意されたい．これと同種の条件のもとで，ハミルトニアン $H=(-\hbar^2/2m)\triangle+V(\boldsymbol{r})$ もまたエルミート演算子であることが示される．

このように，演算子 F がオブザーバブルであるためには，それがエルミートであることが必要であるが，逆にエルミートであるからといって，それがオブザーバブルであるとはいえない．その一例が，第3章で利用する極座標系 (r,θ,φ) における動径運動量演算子 $p_r=(\hbar/i)[\partial/\partial r+1/r]$ である．これがエルミートでありながら，オブザーバブルでないことについては，第3章§1で詳しく説明する．

次に演算子 A と B の積 $A\cdot B$ を考える．これに(1.15)のエルミート共役の定義式を適用すると

$$\int_{-\infty}^{\infty}(A\cdot B\psi_1)^*\psi_2\mathrm{d}q = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1{}^*(A\cdot B)^\dagger\psi_2\mathrm{d}q$$

である．一方，(1.15)の定義を順次に適用すると

$$\int_{-\infty}^{\infty}(A\cdot B\psi_1)^*\psi_2\mathrm{d}q = \int_{-\infty}^{\infty}(B\psi_1)^*A^\dagger\psi_2\mathrm{d}q = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_1{}^*B^\dagger\cdot A^\dagger\psi_2\mathrm{d}q$$

となる．これらの2式を比較すると

$$(A\cdot B)^\dagger = B^\dagger\cdot A^\dagger, \tag{1.18}$$

A と B がエルミート演算子で，$A^\dagger=A$，$B^\dagger=B$ のとき

$$(A\cdot B)^\dagger = B\cdot A \tag{1.19}$$

である．一般に演算子の場合，その積の順序を交換することができず，$A\cdot B\neq B\cdot A$ である．したがって，(1.19)より，エルミート演算子の積はかならずしもエルミートとはならない．

(3) デルタ関数

これまでは，固有値と固有関数を指定する量子数 n は離散的な値をとると仮定してきた．しかし，第1章の障壁との衝突問題の例でみたように，粒子のエネルギーとして任意の正値がとれる場合がある．このようなときは，状態を指定する量子数は連続的な値になり，(1.3)の展開式の右辺は，積分形式で

$$\psi(q) = \int a_f \phi_f(q)\mathrm{d}f \tag{1.20}$$

と表現される．また，離散固有値と連続固有値の両方が許される水素原子の束縛状態と散乱状態のような場合は

$$\psi(q) = \sum_n a_n \phi_n(q) + \int a_f \phi_f(q)\mathrm{d}f \tag{1.21}$$

と展開される．

ここで，連続固有値を扱うのに極めて便利な Dirac のデルタ関数について説明しておく．**デルタ関数**は，その変数 x がある値 ξ に一致したとき無限大で，その他の値では0である次のような偶関数である．

$$\delta(x-\xi) = \begin{cases} +\infty, & x=\xi \\ 0, & x\neq\xi \end{cases}; \quad \delta(x) = \delta(-x). \tag{1.22}$$

すなわち，デルタ関数は直観的には $x=\xi$ の点に立つ針のようにとがった関数で，その積分が

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-\xi)\mathrm{d}x = 1, \quad \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-\xi)\mathrm{d}x = f(\xi) \tag{1.23}$$

で与えられるものとする．ここで $f(x)$ は $x=\xi$ で連続な関数である．(1.22)と(1.23)の条件をみたす関数は厳密には存在しない．デルタ関数は普通の意味での関数ではなく，いわゆる超関数(distribution)といわれているものである．したがって，以下の公式は正確には超関数として証明されるべきであるが，実用上は通常の関数とみて利用しても誤りを生じることはない．デルタ関数に関する公式として，ここで

$$\begin{aligned} &x\delta(x) = 0, \quad \delta(ax) = a^{-1}\delta(x), \\ &\delta(x^2-a^2) = (1/2a)[\delta(x-a)+\delta(x+a)], \quad a>0 \end{aligned} \tag{1.24}$$

をあげておく(問7を参照)．また，デルタ関数の導関数は，$f(x=\pm\infty)\to 0$ の

微分可能な任意関数に対して

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x-\xi)\mathrm{d}x = -\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(\xi) \tag{1.25}$$

を与えるものとして定義される．いま，$\mathrm{d}\delta(x-\xi)/\mathrm{d}x \equiv \delta'(x-\xi)$ と書くと，(1.25)より次の公式が成立する．

$$\delta'(-x) = -\delta'(x), \qquad x\delta'(x) = -\delta(x). \tag{1.26}$$

ここで，デルタ関数の具体的な表式としてよく用いられる例を二つだけあげておこう．その一つは

$$\delta(x) \equiv \lim_{g\to\infty}\frac{\sin gx}{\pi x} \tag{1.27}$$

である．この関数は，$x\to 0$ で

$$\lim_{g\to\infty}\lim_{x\to 0}(g/\pi)(\sin gx/gx) = \lim_{g\to\infty} g/\pi \longrightarrow \infty$$

であり，$x\neq 0$ のときは，$g\to\infty$ で 0 となる．ここで g と x の極限の順序をいれかえたところが，数学者には気に入らないのである．また，積分と極限の順序の交換が可能と仮定すると

$$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x)\mathrm{d}x = \lim_{g\to\infty}\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin gx}{gx}\mathrm{d}(gx) = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin y}{y}\mathrm{d}y = 1,$$

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x-\xi)\mathrm{d}x &= \lim_{g\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,\frac{\sin g(x-\xi)}{\pi(x-\xi)}\mathrm{d}x\\ &= f(\xi)\int_{-\infty}^{\infty}\lim_{g\to\infty}\frac{\sin g(x-\xi)}{\pi(x-\xi)}\,\mathrm{d}x = f(\xi)\end{aligned}$$

となるから，(1.27)は(1.22)と(1.23)の条件をみたしている．(1.27)を用いると

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{ikx}\mathrm{d}k = \lim_{g\to\infty}\int_{-g}^{g}\mathrm{e}^{ikx}\mathrm{d}k = 2\pi\lim_{g\to\infty}\frac{\sin gx}{\pi x} = 2\pi\delta(x)$$

であるから，デルタ関数は積分形で

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{ikx}\mathrm{d}k \tag{1.28}$$

と表わすことができる．この表式は場の量子論で非常によく利用される．

次の例は，無限小のパラメーター $\varepsilon(>0)$ を用いて

$$\delta(x)=\frac{1}{\pi}\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2} \tag{1.29}$$

とするものである．これは，$x=0$ で $1/\varepsilon\to\infty$，$x\neq 0$ のとき $\varepsilon\to 0$ で 0 となり，また

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon}{x^2+\varepsilon^2}\mathrm{d}x=\lim_{\varepsilon\to 0}\varepsilon\cdot\frac{1}{\varepsilon}=1,\qquad \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varepsilon}{(x-\xi)^2+\varepsilon^2}f(x)\mathrm{d}x=f(\xi)$$

で，デルタ関数の性質をもっている．次に

$$1/(x\pm i\varepsilon)=x/(x^2+\varepsilon^2)\mp i\varepsilon/(x^2+\varepsilon^2) \tag{1.30}$$

において，右辺の第1項は

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{x}{x^2+\varepsilon^2}=\begin{cases}1/x, & x\neq 0\\ 0, & x=0\end{cases}$$

である．したがって，$x=0$ で連続な関数に対して

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x}{x^2+\varepsilon^2}f(x)\mathrm{d}x=\mathrm{P}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f(x)}{x}\mathrm{d}x.$$

ここで右辺の P は Cauchy の主値を示す．すなわち，(1.30)は

$$\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{x\pm i\varepsilon}=\mathrm{P}\frac{1}{x}\mp i\pi\delta(x) \tag{1.31}$$

と表わされる．この公式は散乱の理論で利用される．

デルタ関数を利用すると，位置 $\boldsymbol{r}$ にある点電荷 e の電荷密度 $\rho(\boldsymbol{x})$ は

$$\rho(\boldsymbol{x})=e\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}) \tag{1.32}$$

と表現することができる．ここで3次元のデルタ関数は，$\boldsymbol{r}=(\xi,\eta,\zeta)$，$\boldsymbol{x}=(x,y,z)$ として，デルタ関数の積 $\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r})=\delta(x-\xi)\cdot\delta(y-\eta)\cdot\delta(z-\zeta)$ で定義される．(1.32)を用いると，電荷密度の演算子 $\rho(\boldsymbol{x})$ の期待値は

$$\bar{\rho}(\boldsymbol{x})=e\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r=e\psi^*(\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{x}) \tag{1.33}$$

で与えられる．すなわち，Schrödinger がはじめ $|\psi|^2$ をもって電子密度と解釈したのは，(1.32)の演算子の期待値だったのである．しかし，この解釈が正しいのは1粒子系のときだけであり，2粒子系では電荷密度の演算子は

$$\rho(\boldsymbol{x})=e\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_1)+e\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_2)$$

であり，その期待値は

$$\bar{\rho}(\boldsymbol{x}) = e\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)[\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_1)+\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_2)]\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2$$
$$= e\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{x},\boldsymbol{r}_2)\psi(\boldsymbol{x},\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3r_2+e\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{x})\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3r_1$$

で，$|\psi(\boldsymbol{x})|^2$ とは全く似ても似つかぬ形になってしまう．

最後に，(1.3)の展開式に(1.7)を代入すると

$$\psi(q) = \sum_n a_n\phi_n(q) = \int_{-\infty}^{\infty}\sum_n\phi_n(q)\phi_n^*(q')\psi(q')\mathrm{d}q'$$

となる．これが任意の関数 ψ に対して成立するには

$$\sum_n\phi_n(q)\phi_n^*(q') = \delta(q-q') \tag{1.34}$$

でなければならない．この関係は，固有関数系 $\{\phi_n(q)\}$ が完全系を構成しているための必要かつ十分な条件を与える．

問 7 デルタ関数に関する公式(1.24)と(1.26)を証明せよ．

問 8 Poisson の方程式 $\triangle\phi(\boldsymbol{r})=-\delta^3(\boldsymbol{r})$ の特解が，$\phi(\boldsymbol{r})=1/4\pi|\boldsymbol{r}|$ であることを，(1.28)の公式を利用して証明せよ．

(4) 連続固有値

連続固有値をもつオブザーバブルのもっとも簡単な例は，粒子の位置を示す演算子 q である．演算子 q は，任意の状態関数 $\psi(q)$ に変数 q を掛けることにより，新しい状態関数 $q\psi(q)$ をつくる演算子である．粒子は可能なところならどこにも存在しうるから，位置演算子 q の固有値 q' は連続的な値で与えられる．q の固有値方程式は，(1.1)で $F=q$ とおいて

$$q\phi_{q'}(q) = q'\phi_{q'}(q) \tag{1.35}$$

と表わされる．これを $(q-q')\phi_{q'}(q)=0$ として，公式 $x\delta(x)=0$ と比較すれば，オブザーバブル q の固有値 q' に属する固有関数は

$$\phi_{q'}(q) = \delta(q-q') \tag{1.36}$$

であることが分かる．このとき，固有関数 $\phi_{q'}(q)$ の直交規格化性は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_{q'}{}^*(q)\phi_{q''}(q)\mathrm{d}q = \int_{-\infty}^{\infty}\delta(q-q')\delta(q-q'')\mathrm{d}q = \delta(q'-q'')$$

で与えられ，その値は $q'=q''$ で無限大となる．このような場合に，離散固有値のときのように全確率を1に規格化すると，無限大の空間内の有限領域に粒子を発見する確率はつねに0になってしまうからである．(1.36)を(1.20)の展開式に適用すると

$$\psi(q) = \int_{-\infty}^{\infty} a_{q'}\phi_{q'}(q)\mathrm{d}q' = \int_{-\infty}^{\infty} a_{q'}\delta(q-q')\mathrm{d}q' = a_q \qquad (1.37)$$

となる．重ね合わせの原理によると，状態 $\psi(q)$ においてオブザーバブル q が固有値 q' をとる確率は $|a_{q'}|^2\mathrm{d}q'$ で与えられる．したがって，(1.37)より

$$|a_q|^2\,\mathrm{d}q = |\psi(q)|^2\,\mathrm{d}q \qquad (1.38)$$

である．すなわち，粒子の位置分布に関する Born の確率解釈は，仮定 II の重ね合わせの原理の特別な場合にすぎないことに注意されたい．

(5)　縮退のある場合

これまでは縮退はないとしてきたが，ここではオブザーバブル F の同一固有値 f_n に属する独立な固有状態が m 個あるものとする．これを，固有状態が m 重に**縮退**しているという．そこで，これらの m 個の固有関数を $\chi_{n,\alpha}$ $(\alpha=1, 2, \cdots, m)$ と書いて区別する．ここで独立な固有状態という意味は，定数 C_α を $\chi_{n,\alpha}$ に掛けて和をとった線形結合 $\sum_{\alpha=1}^{m} C_\alpha\chi_{n,\alpha}$ が0になるのは，すべての C_α が0のときだけであるということであり，このとき，m 個の $\chi_{n,\alpha}$ は1次独立であるという．1次独立な m 個の固有関数 $\chi_{n,\alpha}$ を用いると，固有値 f_n に属する任意の固有状態 ϕ_n を

$$\phi_n = \sum_{\alpha=1}^{m} a_\alpha \chi_{n,\alpha} \qquad (1.39)$$

と表わすことができる．ここで係数 a_α は任意の複素数である．縮退のあるときでも，$f_m \neq f_n$ のときには，(1.17)の直交性

$$\int_{-\infty}^{\infty} \chi_{m,\alpha}^*(q)\chi_{n,\beta}(q)\mathrm{d}q = 0$$

は成立する．しかし，同じ固有値 f_n に属する固有状態 $\chi_{n,\alpha}$ どうしは直交するとはかぎらない．ここで問題とするのは，直交していない m 個の固有関数 $\chi_{n,\alpha}$ から，どのようにして直交規格化された固有関数系 $\phi_{n,\alpha}$ $(\alpha=1, 2, \cdots, m)$ を構成するかということである．その方法の一つが **Schmidt の方法**である．

表記を簡潔にするために，ここでは

$$\langle \chi_{n,\alpha} | \chi_{n,\beta} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \chi_{n,\alpha}{}^{*} \chi_{n,\beta} \mathrm{d}q \tag{1.40}$$

と書くことにする．この記法については，次の§2で詳しく説明する．さてまず，$\chi_{n,\alpha}$ のうちの1個を任意に選び，それを $\chi_{n,1}$ とする．これを規格化するために，複素定数 a_1 を引き出し，$\chi_{n,1}=a_1\phi_{n,1}$ とすれば $\langle\phi_{n,1}|\phi_{n,1}\rangle=1$ にすることができる．次に $\phi_{n,1}$ に直交する $\phi_{n,2}$ は，$\chi_{n,2}$ と $\phi_{n,1}$ から次のようにしてつくることができる．

$$c_2\phi_{n,2} = \chi_{n,2} - \phi_{n,1}\langle\phi_{n,1}|\chi_{n,2}\rangle. \tag{1.41}$$

ここで定数 c_2 は $\langle\phi_{n,2}|\phi_{n,2}\rangle=1$ になるように決める．(1.41)の $\phi_{n,2}$ が $\phi_{n,1}$ と直交することは，(1.41)に $\phi_{n,1}{}^{*}$ を掛けて積分すると

$$c_2\langle\phi_{n,1}|\phi_{n,2}\rangle = \langle\phi_{n,1}|\chi_{n,2}\rangle - \langle\phi_{n,1}|\phi_{n,1}\rangle\langle\phi_{n,1}|\chi_{n,2}\rangle = 0 \tag{1.42}$$

となることから分かる．同様にして，$\phi_{n,3}$ は

$$c_3\phi_{n,3} = \chi_{n,3} - \phi_{n,1}\langle\phi_{n,1}|\chi_{n,3}\rangle - \phi_{n,2}\langle\phi_{n,2}|\chi_{n,3}\rangle$$

で与えられる．c_3 は $\langle\phi_{n,3}|\phi_{n,3}\rangle=1$ となるように決める．この $\phi_{n,3}$ がさきの $\phi_{n,1}$ と $\phi_{n,2}$ に直交することは，(1.42)と同様の方法で証明される．このような手続きを繰り返すことにより，m 個の直交規格化された固有関数のセット $\{\phi_{n,\alpha}\}$ を構成することができる．この固有関数系を用いれば，任意の状態関数 $\psi(q)$ を，オブザーバブル F の直交規格化された固有関数の完全系 $\{\phi_{n,\alpha}\}$ を用いて

$$\psi(q) = \sum_{n,\alpha} a_{n,\alpha}\phi_{n,\alpha}(q) \tag{1.43}$$

と展開することができる．ただしこのとき

$$\sum_{n,\alpha} |a_{n,\alpha}|^2 = 1$$

である．

(6) 行列表示

固有値方程式(1.1)に左から $\phi_m^{*}(q)$ を掛けて積分すると，(1.8)を用いて

$$F_{m,n} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^{*}(q) F \phi_n(q) \mathrm{d}q = f_n \delta_{n,m} \tag{1.44}$$

をえる．なおここで，縮退のあるときには，量子数 n, m は，(1.43)の (n, α) と (m, β) を表わすものとする．(1.44)を**行列**(matrix)で表わせば

$$\begin{pmatrix} F_{11} & F_{12} & \cdot \\ F_{21} & F_{22} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & f_2 & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \tag{1.45}$$

となり，これは対角型の行列である．ここで，F とは異なる演算子 G を考えると，その行列要素は

$$G_{m,n} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(q) G\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\phi_n(q)\mathrm{d}q \tag{1.46}$$

で与えられ，その行列は一般には対角型にはならない．G がエルミート演算子のときには，(1.16)より

$$\int_{-\infty}^{\infty} (G\phi_m)^* \phi_n \mathrm{d}q = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^* G\phi_n \mathrm{d}q = G_{m,n}$$

であり，一方

$$\int_{-\infty}^{\infty} (G\phi_m)^* \phi_n \mathrm{d}q = \left[\int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^* G\phi_m \mathrm{d}q\right]^* = G_{n,m}{}^*$$

であるから，エルミート演算子の行列要素の間には

$$G_{n,m}{}^* = G_{m,n} \tag{1.47}$$

の関係がある．したがって，エルミート演算子の行列の対角要素は実数であり，また対角要素の並ぶ線を対称軸とする2個の行列要素はたがいに複素共役の数値である．この行列を**エルミート行列**という．

オブザーバブル F の固有関数 $\phi_n(q)$ に G を掛けてできる新しい状態関数を $\psi(q) = G\phi_n(q)$ とする．重ね合わせの原理によると，この状態もまた

$$\psi = G\phi_n = \sum_l a_{n,l}\phi_l \tag{1.48}$$

と展開できる．一方，

$$G_{m,n} = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^* G\phi_n \mathrm{d}q = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^* \psi \mathrm{d}q = \sum_l a_{n,l}\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^* \phi_l \mathrm{d}q$$

$$= \sum_l a_{n,l}\delta_{m,l} = a_{n,m}$$

であるから，この結果を(1.48)に代入すると

$$\psi(q) = G\phi_n(q) = \sum_l \phi_l(q)G_{l,n} \tag{1.49}$$

と表わされる．ここで，$a_{n,m}$ と $G_{m,n}$ の添字の順序が逆であることに注意しよう．ここでもう一つの別の演算子 K をとって，状態関数 $G\cdot K\phi_n$ をつくると，(1.49)より $G\cdot K\phi_n=\sum_m \phi_m(G\cdot K)_{m,n}$ である．また一方，$G\cdot K\phi_n=G(K\phi_n)=G(\sum_k \phi_k K_{k,n})=\sum_k (G\phi_k)K_{k,n}=\sum_k\sum_m \phi_m G_{m,k}K_{k,n}$ となる．これらを比較すると

$$(G\cdot K)_{m,n} = \sum_k G_{m,k}K_{k,n}. \tag{1.50}$$

これは，行列の積の規則にほかならない．

ここで，オブザーバブルに関して成立する次の定理を証明しておこう．

定理 完全系 $\{\phi_n(q)\}$ が，オブザーバブル F と G の同時固有関数であれば，F と G の積の順序が交換でき，$F\cdot G=G\cdot F$ である．逆に，F と G の積が交換可能のとき，一方の固有関数は他方の固有関数である．▌

証明は次のとうりである．まず仮定により，$F\phi_n=f_n\phi_n$，$G\phi_n=g_n\phi_n$ である．したがって，$G\cdot F\phi_n=f_nG\phi_n=f_ng_n\phi_n$．一方 $F\cdot G\phi_n=g_nF\phi_n=g_nf_n\phi_n$ である．任意の状態関数 ψ は，$\psi=\sum_n a_n\phi_n$ と展開できるから，上の結果から $F\cdot G\psi(q)=\sum_n a_nf_ng_n\phi_n(q)$，また $G\cdot F\psi(q)=\sum_n a_nf_ng_n\phi_n(q)$ である．したがって，任意の関数に対して，$(F\cdot G-G\cdot F)\psi(q)=0$ が成立する．これは演算子方程式として，$F\cdot G-G\cdot F=0$ であることを意味する．すなわち，F と G の積は交換可能である．なお，特定の状態関数，たとえばある特定の固有状態 ϕ_l に対して $(F\cdot G-G\cdot F)\phi_l=0$ であっても，$F\cdot G=G\cdot F$ であるとはいえない．すなわち，$F\cdot G\neq G\cdot F$ であっても $(F\cdot G-G\cdot F)\phi_l=0$ となることがあることに注意されたい．その一例が，第3章で説明する角運動量の固有値が0の場合である．

逆に，$F\cdot G=G\cdot F$ のとき，この両辺の行列要素をとると，(1.50)より $\sum_k F_{m,k}G_{k,n}=\sum_k G_{m,k}F_{k,n}$ である．ここで $F\phi_n=f_n\phi_n$ とすると，(1.44)より $F_{m,k}=f_m\delta_{m,k}$．これを上式に代入すると，$(f_m-f_n)G_{m,n}=0$ をえる．したがって，縮退がなく $m\neq n$ のとき，$f_m\neq f_n$ であれば，$m\neq n$ に対して $G_{m,n}=0$ である．

すなわち，$G_{m,n}$ は対角型の行列であり，$G_{m,n}=g_m\delta_{m,n}$ と表わされる．すなわち，F の固有関数 ϕ_n は G の固有関数でもある．なお，縮退のあるときにも，F の固有関数系 $\{\phi_{n,\alpha}\}$ をうまく選ぶことにより，F と G の同時固有関数をつくることができる*.

このように，交換可能で，同時測定が可能なオブザーバブルの最大の組の同時固有関数をとることにより，量子力学的な状態は完全に決定される．このようなオブザーバブルの最大のセットを**オブザーバブルの完全系**という．

次に，オブザーバブル F の固有関数 ϕ_n とその固有値 f_n が知られているとき，その F とは交換不能な演算子 G で与えられるオブザーバブルの固有関数とその固有値 g を求めるにはどのようにしたらよいだろうか．すなわち，$F\phi_m=f_m\phi_m$ で，$F\cdot G\neq G\cdot F$ のとき，固有値方程式

$$G\psi(q)=g\psi(q)$$

の $\psi(q)$ と g を求める．そこで $\psi=\sum_m a_m\phi_m$ と展開して，これを上の固有値方程式に代入し，左から ϕ_n^* を掛けて積分すると，

$$\sum_m a_m\int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*G\phi_m\mathrm{d}q=g\sum_m a_m\int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*\phi_m\mathrm{d}q=g\sum_m a_m\delta_{n,m}$$

となる．すなわち

$$\sum_m(G_{n,m}-\delta_{n,m}g)a_m=0. \tag{1.51}$$

この a_m に関する連立1次方程式が，$a_m=0$ 以外の解をもつためには，(1.51)の係数に関する行列式が0であればよい．すなわち

$$|G_{n,m}-\delta_{n,m}g|=0. \tag{1.52}$$

これを g に関する方程式とみなしたときえられる解が，オブザーバブル G の固有値である．その解の一つを g_i とすると，その g_i に対する(1.51)の方程式は

$$\sum_m(G_{n,m}-\delta_{n,m}g_i)a_{m,i}=0 \tag{1.53}$$

＊　証明は省略するが，F の固有関数系 $\{\phi_{n,\alpha}\}$ を用いたとき，この状態に関する G の行列要素 $G_{n,\alpha;m,\beta}$ は，一般には縮退を示す量子数 α と β に関して対角型にはならない．しかし，F の同じ固有値に属する部分空間内で後に述べるユニタリー変換を行うことにより，F と G を α と β に関して同時に対角化させる固有関数系を決めることができる．

で与えられる．この係数 $a_{m,i}$ に関する方程式を，規格化条件 $\sum_m |a_{m,i}|^2=1$ のもとで解く．こうして決定した係数 $a_{m,i}$ により，固有値 g_i に属する G の固有関数が

$$\psi_i(q) = \sum_m a_{m,i}\phi_m(q) \tag{1.54}$$

により決まる．

なお，(1.52)の行列式を解いてえられた根に m 重根があるとき，その固有値に属する G の固有状態は m 重に縮退している．このときには，重なっている根の値を引きはなすように，元の G に微小なエルミート演算子 εK を適当に追加しておく．ここで ε は無限小のパラメーターである．こうすると，これまで重なっていた m 個の根は ε の程度だけ分離する．そして，それぞれの根に対する演算子 $G+\varepsilon K$ の固有関数 $\psi_i^{(\varepsilon)}$ を決定する．このとき m 個の固有関数 $\psi_i^{(\varepsilon)}$ はいずれも ε の程度だけ分離した固有値に属する固有関数であるから，(1.17)の定理により，たがいに直交している．ここで $\varepsilon\to 0$ の極限をとると，それらの関数間の直交性はそのまま保存されて，直交規格化された m 個の縮退した G の固有関数をえることができる．

(7) 2状態系の固有値問題

上に説明した固有値問題のもっとも簡単な例題として，次の問題をとりあげよう．いまある体系のハミルトニアンが $H=H^{(0)}+V$ で与えられていて，$H^{(0)}$ の固有関数と固有値は分かっているものとし，$H^{(0)}\phi_n(q)=\varepsilon_n\phi_n(q)$ としよう．このとき，$H^{(0)}$ の行列要素は

$$H^{(0)}_{n,m} = \int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(q)H^{(0)}\phi_m(q)\mathrm{d}q = \varepsilon_n\delta_{n,m} \tag{1.55}$$

で与えられ，その行列は対角型になっている．それに対して相互作用 V の行列要素は

$$V_{n,m} = \int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(q)V(q)\phi_m(q)\mathrm{d}q \tag{1.56}$$

で，これは対角型になっていないとする．またここで対角要素は0，すなわち，$V_{n,n}=0$ と仮定する．つまりこのとき，前の F が $H^{(0)}$，G が H に対応する．われわれの目的は，H の固有関数 ψ とその固有値 E を求めることである．す

なわち，解くべき固有値方程式は

$$(H^{(0)}+V)\psi(q) = E\psi(q) \tag{1.57}$$

である．そこで，

$$\psi(q) = \sum_m a_m \phi_m(q) \tag{1.58}$$

と展開し，これを(1.57)に代入し，左から $\phi_n^*(q)$ を掛けて積分すると

$$\sum_m [(\varepsilon_n - E)\delta_{n,m} + V_{n,m}]a_m = 0 \tag{1.59}$$

をえる．これは(1.51)で $G_{n,m} \to \varepsilon_n\delta_{n,m} + V_{n,m}$，$g \to E$ とおいたものである．(1.59)が $a_m=0$ 以外の解をもつためには，

$$|(\varepsilon_n - E)\delta_{n,m} + V_{n,m}| = 0 \tag{1.60}$$

が要求される．この方程式の解として，H の固有値 E が求まる．

ここでとくに，$H^{(0)}$ の固有状態が $\phi_1(q)$ と $\phi_2(q)$ の2個だけしかない2状態系を考える．それぞれの状態の固有値を $\varepsilon_1, \varepsilon_2(>\varepsilon_1)$ とすると，(1.56)の行列は

$$\begin{pmatrix} V_{11} & V_{12} \\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & v \\ v^* & 0 \end{pmatrix}$$

で与えられる．ここで

$$v = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1^*(q) V \phi_2(q) \mathrm{d}q, \qquad v^* = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_2^*(q) V \phi_1(q) \mathrm{d}q$$

である．このとき，(1.60)の行列方程式は

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_1 - E & v \\ v^* & \varepsilon_2 - E \end{vmatrix} = 0 \tag{1.61}$$

であり，その解は

$$E_{\mathrm{I,II}} = (1/2)[(\varepsilon_1+\varepsilon_2) \mp \sqrt{(\varepsilon_2-\varepsilon_1)^2 + 4|v|^2}] \tag{1.62}$$

となる．ここで $(\varepsilon_2-\varepsilon_1) \gg |v|$ とすると

$$E_{\mathrm{I}} \cong \varepsilon_1 - |v|^2/(\varepsilon_2-\varepsilon_1), \qquad E_{\mathrm{II}} \cong \varepsilon_2 + |v|^2/(\varepsilon_2-\varepsilon_1).$$

すなわち，H の固有値の間隔は，相互作用 V の符号に無関係に，$H^{(0)}$ の固有値 ε_2 と ε_1 の間の間隔よりも大きくなる．次に(1.62)の E_{I} と E_{II} を(1.59)に代入して，それぞれの解に対する係数 a_1 と a_2 を求める．E_{I} のときは

$$(\varepsilon_1 - E_{\mathrm{I}})a_1 + va_2 = 0, \qquad v^*a_1 + (\varepsilon_2 - E_{\mathrm{I}})a_2 = 0$$

であり，この方程式を $|a_1|^2+|a_2|^2=1$ の条件のもとで解くと

$$a_1 = \mathrm{e}^{i\delta}v/\sqrt{(E_{\mathrm{I}}-\varepsilon_1)^2+|v|^2}, \qquad a_2 = \mathrm{e}^{i\delta}(\varepsilon_1-E_{\mathrm{I}})/\sqrt{(E_{\mathrm{I}}-\varepsilon_1)^2+|v|^2}$$

をえる．ここでδは不定の位相である．これを(1.58)に代入すると，固有値E_{I}に属するHの固有関数として

$$\psi_{\mathrm{I}}(q) = \mathrm{e}^{i\delta}\left[\frac{v}{\sqrt{(E_{\mathrm{I}}-\varepsilon_1)^2+|v|^2}}\phi_1(q)+\frac{(\varepsilon_1-E_{\mathrm{I}})}{\sqrt{(E_{\mathrm{I}}-\varepsilon_1)^2+|v|^2}}\phi_2(q)\right] \quad (1.63)$$

をえる．同様にして，E_{II}に対する固有関数は

$$\psi_{\mathrm{II}}(q) = \mathrm{e}^{i\delta}\left[\frac{(E_{\mathrm{II}}-\varepsilon_2)}{\sqrt{(E_{\mathrm{II}}-\varepsilon_2)^2+|v|^2}}\phi_1(q)+\frac{v^*}{\sqrt{(E_{\mathrm{II}}-\varepsilon_2)^2+|v|^2}}\phi_2(q)\right]$$

で与えられる*.

問 9 ハミルトニアンの行列が

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & a \\ 0 & \varepsilon_2 & 0 \\ a^* & 0 & \varepsilon_3 \end{pmatrix}$$

で表わされるとき，そのエネルギー固有値を求めよ．ただし，$\varepsilon_3>\varepsilon_2>\varepsilon_1$で，$a$は既知の定数とする．

(8) エネルギー表示と位置表示

Heisenberg が Schrödinger と独立に発見した行列力学は，これまでの一般論で，はじめに対角化されているオブザーバブルFとして，考えている体系のハミルトニアンHそのものを採用したものである．そこでこれを**エネルギー表示**という．Hの固有関数を$\phi_n(q)$，その固有値をE_nとすると，Hの行列要素は

$$H_{n,m} = E_n\delta_{n,m} \quad (1.64)$$

となる．このとき，粒子の位置演算子qと運動量演算子pの行列要素は，それぞれ

$$q_{n,m} = \int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(q)q\phi_m(q)\mathrm{d}q, \qquad p_{n,m} = \int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(q)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\phi_m(q)\mathrm{d}q \quad (1.65)$$

で与えられ，これらは一般に非対角型のエルミート行列で表わされる．

---

* 2 状態系の物理的に興味深い応用例については，「ファインマン物理学 V，量子力学」，岩波書店(1979)を参照するとよい．

これに対して，第1章で述べたSchrödingerの理論は，はじめに対角化しておく演算子Fとして，粒子の位置演算子qを採用したものである．そこでこれを**位置表示**という．すなわち，(1.35)に与えたように$q\,\phi_{q'}(q)=q'\phi_{q'}(q)$としたとき，(1.51)の演算子$G$に対する固有値方程式は，形式的には$\sum_{q''}G_{q',q''}a_{q''}=ga_{q'}$となる．$q$が連続固有値をとることを考慮すれば，それは

$$\int_{-\infty}^{\infty}G_{q',q''}a_{q''}\mathrm{d}q''=ga_{q'} \tag{1.66}$$

と表わされる．ここで行列要素$G_{q',q''}$は，(1.36)より

$$\begin{aligned}G_{q',q''}&=\int_{-\infty}^{\infty}\phi_{q'}^*(q)G\phi_{q''}(q)\mathrm{d}q=\int_{-\infty}^{\infty}\delta(q-q')G\left(q,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\delta(q-q'')\mathrm{d}q\\&=G\left(q',\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\delta(q'-q'')\end{aligned} \tag{1.67}$$

で与えられる．これを(1.66)の左辺に代入すれば

$$\int_{-\infty}^{\infty}G\left(q',\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\delta(q'-q'')a_{q''}\mathrm{d}q''=G\left(q',\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)a_{q'}$$

となる．ここで(1.37)の関係を利用して，$a_q=\psi(q)$と書くと，(1.66)は次の微分方程式に帰着する．

$$G\left(q,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q)=g\psi(q). \tag{1.68}$$

ここで，GとしてハミルトニアンHをとり，gをEにおきかえれば

$$H\left(q,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q)=E\psi(q) \tag{1.69}$$

となる．これは，Schrödingerの固有値方程式にほかならない．

§2　状態ベクトルとDiracの記法

オブザーバブルFの固有関数$\phi_n(q)$が(1.8)の条件をみたすとき，この条件を直交規格化の条件ということはすでに述べた．この用語の由来は，3次元空間でのベクトル解析にある．3次元空間にカーテシアン座標系(x,y,z)をとり，それぞれの座標軸の方向に設定した直交する3個の基本ベクトルを$\boldsymbol{e}^{(1)},\boldsymbol{e}^{(2)},\boldsymbol{e}^{(3)}$と書くと，それらの座標成分は

$$\boldsymbol{e}^{(1)} = \begin{pmatrix} e_x{}^{(1)} \\ e_y{}^{(1)} \\ e_z{}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}^{(2)} = \begin{pmatrix} e_x{}^{(2)} \\ e_y{}^{(2)} \\ e_z{}^{(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{e}^{(3)} = \begin{pmatrix} e_x{}^{(3)} \\ e_y{}^{(3)} \\ e_z{}^{(3)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

で表わされ，これらの基本ベクトルの内積について

$$\boldsymbol{e}^{(i)} \cdot \boldsymbol{e}^{(j)} = e_x{}^{(i)} e_x{}^{(j)} + e_y{}^{(i)} e_y{}^{(j)} + e_z{}^{(i)} e_z{}^{(j)} = \delta_{i,j} \tag{2.1}$$

が成立している．すなわち，(2.1)では異なる基本ベクトルが直交し，またそれぞれの基本ベクトルの内積は1に規格化されている．ここで(2.1)の2番目の表式と

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m{}^*(q) \phi_n(q) \mathrm{d}q = \delta_{m,n} \tag{2.2}$$

を比べると，(2.1)の上つきの (i) と (j) がそれぞれ(2.2)の量子数 m と n に，また3次元ベクトルの x, y, z 成分に関する和が，(2.2)の q に関する積分に対応している．そこで(2.1)にならって，(2.2)を直交規格化条件というのである．この基本ベクトルの成分と固有関数の類似性をさらに押し進めるために，その成分が $\phi_n(q_1)$, $\phi_n(q_2)$, $\cdots$, $\phi_n(q_\infty)$ で与えられる抽象的なベクトル $\boldsymbol{\phi}_n$ を考えて，

$$\boldsymbol{\phi}_n = \begin{pmatrix} \phi_n(q_1) \\ \phi_n(q_2) \\ \vdots \\ \phi_n(q_\infty) \end{pmatrix} \tag{2.3}$$

と表わす．$\phi_n(q)$ がオブザーバブル F の固有関数のとき，(2.3)の $\boldsymbol{\phi}_n$ を F の**固有ベクトル**という．なお本当は，変数 q は $-\infty$ から $+\infty$ までの連続的な値をとるから，(2.3)の表式は正確ではないが，問題の本質を直観的に把握できるように，(2.3)ではあえて q を不連続な数の組 $(q_1, q_2, \cdots, q_\infty)$ で表わしている．また3次元ベクトルのときは，内積を構成する2個の基本ベクトル $\boldsymbol{e}^{(i)}$ と $\boldsymbol{e}^{(j)}$ の座標成分はいずれも実数であるが，(2.2)では左側の固有関数は ϕ_n の複素共役になっている．そこで $\boldsymbol{\phi}_n$ に対応して，そのエルミート共役ベクトル $\boldsymbol{\phi}_n{}^\dagger$ を

$$\boldsymbol{\phi}_n{}^\dagger = (\phi_n{}^*(q_1), \phi_n{}^*(q_2), \cdots, \phi_n{}^*(q_\infty)) \tag{2.4}$$

で定義する．ここでエルミート共役とは，(2.3)のように縦に並んだ1列の行列を，横に並んだ1行の行列に変えて，さらにそれぞれの成分の複素共役をとることを意味している．このとき(2.2)は，ベクトル $\boldsymbol{\phi}_n$ と $\boldsymbol{\phi}_m{}^\dagger$ の内積の形で

$$\boldsymbol{\phi}_m{}^\dagger \cdot \boldsymbol{\phi}_n = \sum_i \phi_m^*(q_i)\phi_n(q_i) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(q)\phi_n(q)\mathrm{d}q = \delta_{m,n} \qquad (2.5)$$

と表現することができる．すると，完全系 $\{\boldsymbol{\phi}_n\}$ により構成され，その内積が(2.5)で定義される抽象的なベクトル空間を考えることができる．

3次元空間でベクトルを用いる利点は，各種の方程式を座標系に無関係に表現することができることである．例えば，(2.1)の $\boldsymbol{e}^{(i)} \cdot \boldsymbol{e}^{(j)} = \delta_{i,j}$ の関係はどの座標系でも成立する．同様に(2.5)の $\boldsymbol{\phi}_m{}^\dagger \cdot \boldsymbol{\phi}_n = \delta_{m,n}$ も，ベクトル $\boldsymbol{\phi}_n$ と $\boldsymbol{\phi}_m{}^\dagger$ の成分を指定する位置座標 q に無関係な形で表わされている．Diracはこのことを利用して，表示(いかなる物理量をはじめに対角化しておくか)に無関係な形式で，量子力学の一般論を構成した．本書のこれまでの議論では，粒子の位置座標 q は固有関数 $\phi_n(q)$ の独立変数として特別な役割を果してきたが，ここで定義した固有ベクトル $\boldsymbol{\phi}_n$ は，位置座標 q に無関係なベクトルである．なおDiracは，$\boldsymbol{\phi}_m{}^\dagger$ を $\langle m|$，$\boldsymbol{\phi}_n$ を $|n\rangle$ と表わし，これらをそれぞれ**ブラ・ベクトル**，**ケット・ベクトル**と名づけ，(2.5)を

$$\langle m|n\rangle = \delta_{m,n} \qquad (2.6)$$

と表現する．こうすると，内積がブラ・ケットで表わされるというシャレである．また，(2.5)の定義から，$(\boldsymbol{\phi}_m{}^\dagger \cdot \boldsymbol{\phi}_n)^* = \boldsymbol{\phi}_n{}^\dagger \cdot \boldsymbol{\phi}_m$ である．これをDiracの記法で表わせば

$$\langle m|n\rangle^* = \langle n|m\rangle \qquad (2.7)$$

である．

なおここで注意すべきことは，3次元のベクトル解析では，空間の次元数を与える独立な基本ベクトルの数，つまり(2.1)の上つきの (i) の数と，それぞれの基本ベクトルの座標成分の数，すなわち(2.1)の下の添字 (x, y, z) の数は，どちらも3個であってその数が一致しているが，いま考えている抽象的なベクトル空間では，完全系を構成する固有ベクトル $\boldsymbol{\phi}_n$ の n の数は，一般にその成分を示す q のとる数とは一致していないことである．いまの場合，n の数は有限個か，または可付番無限個であるとしているのに対して，q のとる値は連続無限個である．

さて，3次元空間内の任意のベクトル $\boldsymbol{A}$ は基本ベクトルを用いて

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{e}^{(1)}A_{(1)} + \boldsymbol{e}^{(2)}A_{(2)} + \boldsymbol{e}^{(3)}A_{(3)} \qquad (2.8)$$

と表わされる．ここで，$\boldsymbol{A}$ の成分 $(A_{(1)}, A_{(2)}, A_{(3)})$ はそれぞれ

$$A_{(1)} = \boldsymbol{e}^{(1)}\cdot\boldsymbol{A}, \quad A_{(2)} = \boldsymbol{e}^{(2)}\cdot\boldsymbol{A}, \quad A_{(3)} = \boldsymbol{e}^{(3)}\cdot\boldsymbol{A} \tag{2.9}$$

で与えられる．(2.8)と(2.9)に対応して，オブザーバブル F の固有関数 $\phi_n(q)$ で，任意の状態関数 $\psi(q)$ を展開したときの表式

$$\psi(q) = \sum_n \phi_n(q) a_n, \quad a_n = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_n^*(q)\psi(q)\mathrm{d}q \tag{2.10}$$

は，位置座標 q に無関係な形で

$$\boldsymbol{\psi} = \sum_n \boldsymbol{\phi}_n a_n, \quad a_n = \boldsymbol{\phi}_n^\dagger\cdot\boldsymbol{\psi}$$

または

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle a_n, \quad a_n = \langle n|\psi\rangle \tag{2.11}$$

と表わすことができる．ここで $\psi(q_1), \psi(q_2), \cdots, \psi(q_\infty)$ を成分とするベクトル $\boldsymbol{\psi}$ または $|\psi\rangle$ を，一般に**状態ベクトル**という．(2.11)の表式から，(2.10)の従来の表式にもどすには，(2.11)の左から $\langle q|$ を掛けて

$$\langle q|\psi\rangle = \sum_n \langle q|n\rangle a_n$$

とし，

$$\langle q|\psi\rangle = \psi(q), \quad \langle q|n\rangle = \phi_n(q) \tag{2.12}$$

とおけばよい．ここで $\langle q|$ はオブザーバブル q の固有ブラ・ベクトルである．なお上で，$\langle q|$ を(2.11)に掛けると $\langle q||\psi\rangle$ となるが，これを $\langle q|\psi\rangle$ と略記する．(2.11)の第2式を第1式に代入すると

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle \tag{2.13}$$

となる．$|\psi\rangle$ は任意の状態ベクトルであるから，これを(2.13)の両辺から外すと

$$\sum_n |n\rangle\langle n| = 1 \tag{2.14}$$

となる．これは，(1.34)の完全性の条件を，表示に無関係な形式で表わしたものである．事実，(2.14)の左右両辺にそれぞれ $\langle q|$ および $|q'\rangle$ を掛けると，$\sum_n \langle q|n\rangle\langle n|q'\rangle = \langle q|q'\rangle$ となる．ここで(2.7)と(2.12)および $\langle q|q'\rangle = \phi_{q'}(q) = \delta(q-q')$ を用いると，(2.14)は $\sum_n \phi_n(q)\phi_n^*(q') = \delta(q-q')$ となり，(1.34)が

えられる．

オブザーバブル F の固有値が離散固有値だけでなく連続固有値をももつとき，(2.13)は，

$$|\psi\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle + \int |f\rangle\langle f|\psi\rangle \mathrm{d}f \tag{2.15}$$

と一般化される．これに伴って，完全性の条件は

$$\sum_n |n\rangle\langle n| + \int |f\rangle\langle f| \mathrm{d}f = 1 \tag{2.16}$$

で与えられる．

任意の関数 $\psi(q)$ の Fourier 変換

$$\psi(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{ipq/\hbar}\psi(p)\mathrm{d}p$$

を考えよう．ここで p は運動量の固有値である．これを Dirac の記法で表現すると

$$\langle q|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{ipq/\hbar}\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p \tag{2.17}$$

となる．一方，連続固有値に対する完全性の条件 $1=\int \mathrm{d}p\,|p\rangle\langle p|$ の両辺に $\langle q|$ と $|\psi\rangle$ を掛けると

$$\langle q|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p \tag{2.18}$$

となる．(2.17)と(2.18)を比較すると

$$\langle q|p\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}\mathrm{e}^{ipq/\hbar} \tag{2.19}$$

をえる．すなわち，$\langle q|p\rangle$ は位置表示から**運動量表示**への変換関数にほかならない．

任意の演算子 F をとり，これを任意の状態関数 $\psi_1(q)$ と $\psi_2(q)$ ではさんでつくった行列要素を，(2.12)を用いて Dirac の記法，または状態ベクトル $\boldsymbol{\psi}_1$ および $\boldsymbol{\psi}_2$ で表わすと

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(q)F\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi_2(q)\mathrm{d}q &= \int \langle\psi_1|q\rangle F\langle q|\psi_2\rangle \mathrm{d}q \\ &= \langle\psi_1|\hat{F}|\psi_2\rangle = \boldsymbol{\psi}_1^\dagger \hat{F}\boldsymbol{\psi}_2\end{aligned} \tag{2.20}$$

となる．ここで $\hat{F}$ は

$$\hat{F} \equiv \int |q\rangle F\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\langle q|\mathrm{d}q \tag{2.21}$$

で定義される新しい演算子である．この演算子はこれまでの演算子 F のように状態関数 $\phi(q)$ に作用する解析的な演算子とは違い，状態ベクトル $|\phi\rangle$ に作用する演算子である．そこでこの種の演算子には上に ^ 印をつけて，従来の演算子と区別する．$\hat{F}$ が状態ベクトルに作用する演算子であることは，次のようにして理解される．すなわち，$\hat{F}$ に $|\phi\rangle$ を作用させると，(2.21)より

$$\hat{F}|\phi\rangle = \int |q\rangle F\langle q|\phi\rangle \mathrm{d}q = \int |q\rangle F\phi(q)\mathrm{d}q$$

となる．つまり，$\hat{F}$ を作用させると，係数 $\phi(q)$ をもつ状態ベクトル $|\phi\rangle = \int |q\rangle\phi(q)\mathrm{d}q$ が，係数 $F\phi(q)$ をもつ状態ベクトル $\int |q\rangle F\phi(q)\mathrm{d}q$ に変わる．この状態ベクトルの変化をもたらすのが，新しい演算子 $\hat{F}$ であり，その変化した状態を $\hat{F}|\phi\rangle$ で表わすのである．

演算子 F がオブザーバブルのとき，(2.21)の $\hat{F}$ もオブザーバブルとよぶ．オブザーバブル $\hat{F}$ を表示に無関係に表わすには次のようにすればよい．すなわち，F の固有関数 $\phi_n(q) = \langle q|n\rangle$ および，(2.14)の完全性の条件を用いて，(2.21)を次のように変形する．

$$\begin{aligned}
\hat{F} &= \int |q\rangle F\langle q|\mathrm{d}q = \sum_{n,m}\int |n\rangle\langle n|q\rangle F\langle q|m\rangle\langle m|\mathrm{d}q \\
&= \sum_{n,m}\int |n\rangle\langle n|q\rangle F\phi_m(q)\langle m|\mathrm{d}q = \sum_{n,m}\int |n\rangle\langle n|q\rangle f_m\langle q|m\rangle\langle m|\mathrm{d}q \\
&= \sum_{n,m} f_m|n\rangle\langle n|m\rangle\langle m| = \sum_n |n\rangle f_n\langle n|.
\end{aligned} \tag{2.22}$$

ここで完全性の条件と直交規格化性

$$\int |q\rangle\langle q|\mathrm{d}q = 1, \quad \langle n|m\rangle = \int \mathrm{d}q\langle n|q\rangle\langle q|m\rangle = \int \phi_n^*(q)\phi_m(q)\mathrm{d}q = \delta_{n,m} \tag{2.23}$$

を用いている．(2.22)の最後の表式は表示に無関係な形で表わされており，

$$\hat{F} = \sum_n |n\rangle f_n\langle n| \tag{2.24}$$

を，演算子 $\hat{F}$ の**スペクトル表示**という．スペクトル表示を用いると，状態ベクトル $|m\rangle$ が演算子 $\hat{F}$ の固有値 f_m に属する固有ベクトルであることが一目瞭然となる．なぜなら，

$$\hat{F}|m\rangle = \sum_n |n\rangle f_n \langle n|m\rangle = \sum_n |n\rangle f_n \delta_{n,m} = f_m|m\rangle \qquad (2.25)$$

となるからである．

次にエルミートとはかぎらない演算子 A を考えたとき，その行列要素は，(2.20)と同じく

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(q) A \psi_2(q) \mathrm{d}q = \boldsymbol{\psi}_1^\dagger \hat{A} \boldsymbol{\psi}_2 = \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle \qquad (2.26)$$

と表わされる．(2.26)の複素共役をとると

$$\begin{aligned} \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle^* &= (\boldsymbol{\psi}_1^\dagger \hat{A} \boldsymbol{\psi}_2)^* \\ &= \left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(q) A \psi_2(q) \mathrm{d}q\right]^* = \int_{-\infty}^{\infty} (A\psi_2(q))^* \psi_1(q) \mathrm{d}q \\ &= (\hat{A}\boldsymbol{\psi}_2)^\dagger \cdot \boldsymbol{\psi}_1 = \{\hat{A}|\psi_2\rangle\}^\dagger |\psi_1\rangle \end{aligned} \qquad (2.27)$$

である．一方，(1.15)のエルミート共役演算子の定義より

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} (A\psi_2(q))^* \psi_1(q) \mathrm{d}q &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_2^*(q) A^\dagger \psi_1(q) \mathrm{d}q \\ &= \boldsymbol{\psi}_2^\dagger \hat{A}^\dagger \boldsymbol{\psi}_1 = \langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle \end{aligned} \qquad (2.28)$$

と表わされる．(2.27)の最初と(2.28)の最後の表式を比較すると，演算子 $\hat{A}$ のエルミート共役演算子 $\hat{A}^\dagger$ は，任意の状態ベクトル $|\psi_1\rangle$ と $|\psi_2\rangle$ に対して

$$\langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_2 \rangle^* \qquad (2.29)$$

で定義されることが分かる．また，(2.27)と(2.28)の最後の表式を比較し，状態ベクトル $|\psi_1\rangle$ が任意であることに注意して，これを除くと

$$\{\hat{A}|\psi_2\rangle\}^\dagger = \langle \psi_2 | \hat{A}^\dagger \qquad (2.30)$$

となる．すなわち，任意のケット・ベクトルに演算子 $\hat{A}$ が作用するとき，それは，ブラ・ベクトルに $\hat{A}^\dagger$ を右から作用させることに対応する．

最後に，(2.29)より

$$\langle \psi_1 | \hat{A} \cdot \hat{B} | \psi_2 \rangle^* = \langle \psi_2 | (\hat{A} \cdot \hat{B})^\dagger | \psi_1 \rangle$$

であり，一方

$$\langle\psi_1|\hat{A}\cdot\hat{B}|\psi_2\rangle^* = \left(\int_{-\infty}^{\infty}\psi_1{}^*(q)A\cdot B\psi_2(q)\mathrm{d}q\right)^* = \int_{-\infty}^{\infty}(A\cdot B\psi_2)^*\psi_1\mathrm{d}q$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty}(B\psi_2)^*A^\dagger\psi_1\mathrm{d}q = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_2{}^*B^\dagger\cdot A^\dagger\psi_1\mathrm{d}q = \langle\psi_2|\hat{B}^\dagger\cdot\hat{A}^\dagger|\psi_1\rangle$$

であるから，(1.18)に対応して

$$(\hat{A}\cdot\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\cdot\hat{A}^\dagger \tag{2.31}$$

である．

演算子 A がエルミートのとき，$A^\dagger=A$ であるから，$\hat{A}^\dagger=\hat{A}$ である．このとき，(2.29)より

$$\langle\psi_1|\hat{A}|\psi_2\rangle^* = \langle\psi_2|\hat{A}|\psi_1\rangle \tag{2.32}$$

である．

問 10　(2.19)の変換関数を用いて，運動量表示で

$$\hat{p}|\psi\rangle = \int|p\rangle p\langle p|\psi\rangle\mathrm{d}p, \qquad \hat{q}|\psi\rangle = \int|p\rangle i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\langle p|\psi\rangle$$

と表わされることを示せ．

§3　正準交換関係と不確定性関係

状態ベクトルに作用する演算子の定義(2.21)を用い，これに任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ を作用させると，位置演算子 $\hat{q}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ の積に対して

$$\hat{q}\cdot\hat{p}|\psi\rangle = \int|q\rangle q\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\langle q|\psi\rangle\mathrm{d}q, \qquad \hat{p}\cdot\hat{q}|\psi\rangle = \int|q\rangle\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}q\langle q|\psi\rangle\mathrm{d}q$$

となる．これらから

$$(\hat{q}\cdot\hat{p}-\hat{p}\cdot\hat{q})|\psi\rangle = \int\frac{\hbar}{i}|q\rangle\left(q\frac{\partial}{\partial q}-\frac{\partial}{\partial q}q\right)\psi(q)\mathrm{d}q = -\frac{\hbar}{i}\int|q\rangle\psi(q)\mathrm{d}q$$
$$= i\hbar\int|q\rangle\langle q|\psi\rangle\mathrm{d}q = i\hbar|\psi\rangle.$$

この関係は任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して成立する．したがって，表示に無関係に演算子の間の関係として

$$[\hat{q},\hat{p}] = i\hbar \tag{3.1}$$

が成り立つ．ここで左辺は

$$[\hat{A},\hat{B}]\equiv\hat{A}\cdot\hat{B}-\hat{B}\cdot\hat{A} \tag{3.2}$$

である．(3.1)を**正準交換関係**，演算子 $\hat{q}$ と $\hat{p}$ を**正準演算子**という．(3.2)の定義から，恒等式

$$\begin{aligned}
&[\hat{A}_1\cdot\hat{A}_2,\hat{B}]=[\hat{A}_1,\hat{B}]\hat{A}_2+\hat{A}_1[\hat{A}_2,\hat{B}],\\
&[\hat{A},\hat{B}_1\cdot\hat{B}_2]=[\hat{A},\hat{B}_1]\hat{B}_2+\hat{B}_1[\hat{A},\hat{B}_2],\\
&[\hat{A},[\hat{B},\hat{C}]]+[\hat{B},[\hat{C},\hat{A}]]+[\hat{C},[\hat{A},\hat{B}]]=0
\end{aligned} \tag{3.3}$$

がえられる．これらの恒等式は，演算子の順序に気をつけながら，(3.2)の定義により両辺を分解して比較すれば容易に証明される．なお，(3.3)の第3の恒等式を**Jacobiの恒等式**という．(3.1)の正準交換関係は系の自由度が1個の場合の関係であるが，自由度が多いときには

$$[\hat{q}_i,\hat{p}_j]=i\hbar\delta_{i,j},\qquad[\hat{q}_i,\hat{q}_j]=[\hat{p}_i,\hat{p}_j]=0 \tag{3.4}$$

である．

(3.1)の交換関係と(3.3)の恒等式から

$$\begin{aligned}
&[\hat{q}^2,\hat{p}]=\hat{q}[\hat{q},\hat{p}]+[\hat{q},\hat{p}]\hat{q}=2i\hbar\hat{q},\\
&[\hat{q},\hat{p}^2]=\hat{p}[\hat{q},\hat{p}]+[\hat{q},\hat{p}]\hat{p}=2i\hbar\hat{p}.
\end{aligned}$$

これより数学的帰納法により，ベキ $\hat{q}^n$ と $\hat{p}^n$ に対して

$$[\hat{q}^n,\hat{p}]=ni\hbar\hat{q}^{n-1},\qquad[\hat{q},\hat{p}^n]=ni\hbar\hat{p}^{n-1} \tag{3.5}$$

であることが示される．ここで演算子 $\hat{q}$ の関数 $A(\hat{q})$ の微係数を

$$\frac{\mathrm{d}A(\hat{q})}{\mathrm{d}\hat{q}}=\lim_{\varepsilon\to0}\frac{A(\hat{q}+\varepsilon)-A(\hat{q})}{\varepsilon} \tag{3.6}$$

で定義する．ここで ε は c 数である．演算子 $\hat{p}$ の関数の微係数も(3.6)と同様に定義すると，(3.5)は

$$[\hat{q}^n,\hat{p}]=i\hbar\mathrm{d}\hat{q}^n/\mathrm{d}\hat{q},\qquad[\hat{q},\hat{p}^n]=i\hbar\mathrm{d}\hat{p}^n/\mathrm{d}\hat{p}$$

と表わされる．したがって，$\hat{q}$ のベキ級数で表わされる任意の演算子 $A(\hat{q})$ に対して

$$[A(\hat{q}),\hat{p}]=i\hbar\mathrm{d}A(\hat{q})/\mathrm{d}\hat{q} \tag{3.7}$$

であり，$\hat{p}$ のベキ級数で与えられる任意の演算子 $A(\hat{p})$ に対して

$$[\hat{q},A(\hat{p})]=i\hbar\mathrm{d}A(\hat{p})/\mathrm{d}\hat{p} \tag{3.8}$$

が成立する．

上の $A(\hat{q})$ として，指数関数をとった

$$\exp(i\lambda\hat{q}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\lambda)^n}{n!}\hat{q}^n \tag{3.9}$$

はとくによく用いられる．ここで λ は任意の実数である．(3.7)を用いると，$[\exp(i\lambda\hat{q}), \hat{p}] = -\lambda\hbar \exp(i\lambda\hat{q})$ より

$$\hat{p}e^{i\lambda\hat{q}} = e^{i\lambda\hat{q}}(\hat{p}+\hbar\lambda)$$

をえる．ここで $\hat{p}|p'\rangle = p'|p'\rangle$ で定義される運動量 $\hat{p}$ の固有ベクトルをとり，これを上式に作用させると

$$\hat{p}e^{i\lambda\hat{q}}|p'\rangle = e^{i\lambda\hat{q}}(\hat{p}+\hbar\lambda)|p'\rangle = (p'+\hbar\lambda)e^{i\lambda\hat{q}}|p'\rangle \tag{3.10}$$

となる．すなわち，$|p'\rangle$ が運動量 $\hat{p}$ の固有値 p' に属する固有ベクトルならば，$\exp(i\lambda\hat{q})|p'\rangle$ は固有値 $p'+\hbar\lambda$ の $\hat{p}$ の固有ベクトルである．λ は任意の実数であるから，運動量 $\hat{p}$ の固有値の全体は，$-\infty$ から $+\infty$ にわたる実数値をとることになる．また，実数 μ を用いて $\exp[-i\mu\hat{p}]$ をつくると，上と同様に

$$\hat{q}e^{-i\mu\hat{p}}|q'\rangle = (q'+\hbar\mu)e^{-i\mu\hat{p}}|q'\rangle$$

となり，位置演算子 $\hat{q}$ の固有値も $\pm\infty$ の間の連続的な値をとることが分かる．したがって，極座標系における動径座標 r のように負の値が許されないものは，正準変数ではないことに注意しよう．

ある古典的体系があったとき，その系を量子力学的な系に移す量子化の手続きは，その系の古典的な正準変数 $q(t)$ と $p(t)$ を，量子力学的な正準演算子 $\hat{q}$ と $\hat{p}$ におきかえて，これらに対して正準交換関係

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \tag{3.11}$$

を要求することで与えられる．ここで位置表示をとり

$$\hat{q} \longrightarrow q, \quad \hat{p} \longrightarrow \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}$$

としたのが，第1章(2.6)で与えたSchrödingerの量子化の手続きにほかならない．しかしこのとき，任意の q の関数 $f(q)$ をとり

$$\hat{p} \longrightarrow p = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}+f(q) \tag{3.12}$$

としても，交換関係 $[q, p] = i\hbar$ はみたされる．ところが，この不定因子 $f(q)$ は状態関数 $\psi(q)$ の位相因子の不定性に帰着させることができる．いま，

$$\phi(q) = e^{i\gamma(q)}\psi(q) \tag{3.13}$$

とおくと，オブザーバブル F の期待値は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(q)F\psi(q)\mathrm{d}q=\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*\mathrm{e}^{i\gamma}F\mathrm{e}^{-i\gamma}\phi\mathrm{d}q=\int_{-\infty}^{\infty}\phi^*(q)F'\phi(q)\mathrm{d}q$$

となる．ここで

$$F'=\mathrm{e}^{i\gamma}F\mathrm{e}^{-i\gamma} \tag{3.14}$$

である．すなわち，状態関数が(3.13)の変換をうけると，それに伴って演算子 F は(3.14)の F' に変換される．ここで F として，$p=(\hbar/i)\partial/\partial q+f(q)$ と選ぶと

$$p'=\mathrm{e}^{i\gamma}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}+f(q)\right)\mathrm{e}^{-i\gamma}.$$

これを任意の関数 $\chi(q)$ に作用させると

$$p'\chi=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\chi}{\partial q}-\left(\hbar\frac{\partial\gamma}{\partial q}-f(q)\right)\chi(q)$$

となる．そこで(3.13)の右辺の指数の $\gamma(q)$ として，$\hbar\partial\gamma(q)/\partial q=f(q)$ の解をもってくれば，$p'=(\hbar/i)\partial/\partial q$ となり，(3.12)の不定因子 $f(q)$ を除去することができる．

位置演算子 $\hat{q}$ と運動量演算子 $\hat{p}$ の間に(3.11)の交換関係が要求され，それらの演算子の積の順序の交換が不能であるということは，これらの演算子の同時固有状態が存在せず，一方の演算子の固有状態においては，他方の測定値はまったく不確定であることを意味する．これは，この章のはじめに定性的に説明した Heisenberg の不確定性関係にほかならない．ここで，一般に交換不能なオブザーバブルの間には不確定性関係が成立することを証明しよう．いま，3個のオブザーバブル $\hat{A},\hat{B}$ および $\hat{C}$ の間に，交換関係

$$[\hat{A},\hat{B}]=i\hat{C} \tag{3.15}$$

が成立しているとする．オブザーバブル $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の任意の状態 $|\psi\rangle$ に対する期待値，$\bar{A}=\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$, $\bar{B}=\langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle$ からの偏差を $\Delta\hat{A}\equiv\hat{A}-\bar{A}$, $\Delta\hat{B}\equiv\hat{B}-\bar{B}$ と書くと，

$$[\Delta\hat{A},\Delta\hat{B}]=[\hat{A},\hat{B}]=i\hat{C} \tag{3.16}$$

である．ここで実数 α を用いて，関数 $I(\alpha)$ を

$$I(\alpha)=\langle\psi|(\alpha\Delta\hat{A}-i\Delta\hat{B})\cdot(\alpha\Delta\hat{A}+i\Delta\hat{B})|\psi\rangle$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} |(\alpha \varDelta A + i \varDelta B)\psi(q)|^2 \mathrm{d}q \tag{3.17}$$

で定義する．ここで(3.17)の2番目の表式は，1番目の表式を位置表示で書いたものである．これから，$I(\alpha) \geqq 0$ であることが分かる．(3.17)は次のように書き直される．

$$\begin{aligned} I(\alpha) &= \langle \psi | \{\alpha^2(\varDelta \hat{A})^2 + i\alpha[\varDelta \hat{A}, \varDelta \hat{B}] + (\varDelta \hat{B})^2\} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \{\alpha^2(\varDelta \hat{A})^2 - \alpha \hat{C} + (\varDelta \hat{B})^2\} | \psi \rangle \\ &= \alpha^2 \overline{(\varDelta A)^2} - \alpha \bar{C} + \overline{(\varDelta B)^2}. \end{aligned}$$

この α に関する2次式がつねに正または0であるためには，その判別式が負または0でなくてはならない．したがって，不確定性関係

$$\overline{(\varDelta A)^2} \cdot \overline{(\varDelta B)^2} \geqq (\bar{C})^2/4 \tag{3.18}$$

が成立する．ここで $\hat{A} = \hat{q}$, $\hat{B} = \hat{p}$, $\hat{C} = \hbar$ とおくと

$$\sqrt{\overline{(\varDelta q)^2} \cdot \overline{(\varDelta p)^2}} \geqq \hbar/2 \tag{3.19}$$

となる．これが粒子の位置と運動量に関する **Heisenberg の不確定性関係**の正確な表式である．

問 11 (3.19)の不確定性がその最小値 $\hbar/2$ をとるときに，状態関数 $\psi(q)$ は，Gauss 関数

$$\psi(q) = A \exp[-q^2/2\overline{(\varDelta q)^2}]$$

であることを示せ．ここで A は定数であり，また，$\bar{q} = \bar{p} = 0$ とする．

§4 ユニタリー変換

演算子 $\hat{U}$ とそのエルミート共役演算子 $\hat{U}^\dagger$ の積が

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^\dagger = 1 \tag{4.1}$$

であるとき，この演算子 $\hat{U}$ を**ユニタリー演算子**という．(4.1)が成立するとき，$\hat{U}^\dagger$ は $\hat{U}$ の逆演算子になっているので，$\hat{U}^\dagger$ を $\hat{U}^{-1}$ と書くことができる．すなわち，

$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger \tag{4.2}$$

である．したがって，$(\hat{U}^{-1})^\dagger = \hat{U}$ である．ここで，任意のケット・ベクトル $|\psi\rangle$ をとり，ユニタリー演算子 $\hat{U}$ を用いて，

$$|\psi'\rangle = \hat{U} |\psi\rangle \tag{4.3}$$

と変換する．(2.30)より，(4.3)のエルミート共役をとると，$\langle\psi'|=\langle\psi|\hat{U}^\dagger$である．すると

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^\dagger\hat{U}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle$$

となるから，(4.3)の変換によって$\langle\psi|\psi\rangle$の値は不変に保たれる．なお，ベクトルの長さに対応する$\sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$を**ノルム**という．このようにノルムを不変に保つ変換を**ユニタリー変換**という．これは3次元空間でのベクトルの直交変換に対応するものである．

いま，オブザーバブル$\hat{F}$の固有状態$|n\rangle$をとり，$\hat{F}|n\rangle=f_n|n\rangle$とする．これに左から$\hat{U}$を掛けると

$$\hat{U}\hat{F}|n\rangle = \hat{U}\hat{F}\hat{U}^{-1}\hat{U}|n\rangle = \hat{F}'\hat{U}|n\rangle$$

となる．ここで

$$\hat{F}' = \hat{U}\hat{F}\hat{U}^{-1} \tag{4.4}$$

である．このとき，$\hat{F}'\hat{U}|n\rangle=\hat{U}\hat{F}|n\rangle=f_n\hat{U}|n\rangle$であるから，変換された状態$\hat{U}|n\rangle$は$\hat{F}'$の固有ベクトルであり，その固有値$f_n$は$\hat{F}$の固有値と同じである．また$\hat{F}'$は$\hat{F}$と同じくエルミート演算子である．なぜなら，(2.31)により

$$\hat{F}'^\dagger = (\hat{U}\hat{F}\hat{U}^{-1})^\dagger = (\hat{U}^{-1})^\dagger\hat{F}^\dagger\hat{U}^\dagger = \hat{U}\hat{F}\hat{U}^{-1} = \hat{F}' \tag{4.5}$$

となるからである．

ここで演算子$\hat{F}$として，正準演算子$\hat{q}$と$\hat{p}$を選ぶと，(4.4)のユニタリー変換は

$$\hat{q}' = \hat{U}\hat{q}\hat{U}^{-1}, \qquad \hat{p}' = \hat{U}\hat{p}\hat{U}^{-1} \tag{4.6}$$

となる．このとき

$$[\hat{q}',\hat{p}'] = \hat{U}[\hat{q},\hat{p}]\hat{U}^{-1} = i\hbar\hat{U}\hat{U}^{-1} = i\hbar \tag{4.7}$$

であり，(4.6)の変換に対して，正準交換関係は不変である．すなわち，$\hat{q}$と$\hat{p}$が正準演算子なら，$\hat{q}'$と$\hat{p}'$もまた正準演算子である．そこで，古典力学にならって，正準交換関係を不変に保つ変換を**正準変換**という．すなわち，ユニタリー変換は正準変換である．

ここでオブザーバブル$\hat{F}$と交換不能なオブザーバブル$\hat{G}$をとり，これを次のように変換する．

$$\hat{G}' = \hat{U}\hat{G}\hat{U}^{-1}. \tag{4.8}$$

そこで$\hat{F}$の固有ベクトル$|n\rangle$を用いて(4.8)の行列要素をとると

$$\begin{aligned}\langle n|\hat{G}'|m\rangle &= \langle n|\hat{U}\hat{G}\hat{U}^{-1}|m\rangle \\ &= \sum_{i,j}\langle n|\hat{U}|i\rangle\langle i|\hat{G}|j\rangle\langle j|\hat{U}^{-1}|m\rangle \end{aligned} \tag{4.9}$$

となる．ここで $|i\rangle$ と $|j\rangle$ も $\hat{F}$ の固有ベクトルであり，2番目の等号では，その完全性を用いている．さて，(4.9)の左辺の行列がたまたま対角型になっていて

$$\langle n|\hat{G}'|m\rangle = g_n\delta_{n,m} \tag{4.10}$$

であるとしよう．このとき(4.9)は

$$\sum_{i,j}\langle n|\hat{U}|i\rangle\langle i|\hat{G}|j\rangle\langle j|\hat{U}^{-1}|m\rangle = g_n\delta_{n,m}$$

となる．これに左から $\langle k|\hat{U}^{-1}|n\rangle$ を掛けて，量子数 n に関する和をとると，上式の左辺は

$$\begin{aligned}&\sum_{i,j}\sum_{n}\langle k|\hat{U}^{-1}|n\rangle\langle n|\hat{U}|i\rangle\langle i|\hat{G}|j\rangle\langle j|\hat{U}^{-1}|m\rangle \\ &= \sum_{i,j}\langle k|\hat{U}^{-1}\hat{U}|i\rangle\langle i|\hat{G}|j\rangle\langle j|\hat{U}^{-1}|m\rangle \\ &= \sum_{i,j}\langle k|i\rangle\langle i|\hat{G}|j\rangle\langle j|\hat{U}^{-1}|m\rangle = \sum_{i,j}\delta_{k,i}\langle i|\hat{G}|j\rangle\langle j|\hat{U}^{-1}|m\rangle \\ &= \sum_{j}\langle k|\hat{G}|j\rangle\langle j|\hat{U}^{-1}|m\rangle\end{aligned}$$

となる．ここで，$k\to n$, $j\to m$ および $m\to i$ と書きかえると，方程式

$$\sum_{m}\langle n|\hat{G}|m\rangle\langle m|\hat{U}^{-1}|i\rangle = g_i\langle n|\hat{U}^{-1}|i\rangle \tag{4.11}$$

がえられる．また，$G_{n,m}=\langle n|\hat{G}|m\rangle$, $\langle m|\hat{U}^{-1}|i\rangle=\langle m|\hat{U}^{\dagger}|i\rangle=\langle i|\hat{U}|m\rangle^{*}\equiv a_{m;i}$ と書くと，(4.11)は

$$\sum_{m}G_{n,m}a_{m;i} = g_i a_{n;i} \tag{4.12}$$

となる．この方程式は，(1.53)の固有値方程式にほかならない．すなわち，固有値方程式(4.12)を解くということは，オブザーバブル $\hat{G}'=\hat{U}\hat{G}\hat{U}^{-1}$ の行列を(4.10)のように対角型にするようなユニタリー変換 $\hat{U}$ を求めることと同等である．

§5　運動法則

(1)　Schrödinger の方程式

これまでは，ある特定の時刻において，量子力学的状態がどのように設定されるかという問題について述べてきた．この節で問題にするのは，そのようにして設定された状態が時間の経過とともにどのように変動するかを規定する運動の法則である．第1章で述べたように，それは Schrödinger の方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(q,t)}{\partial t} = H\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q,t) \tag{5.1}$$

で与えられる．この方程式を Dirac の記法で表わすと，

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{5.2}$$

となる．ここで $\hat{H}=H(\hat{q},\hat{p})$ である．(5.2)が(5.1)と同等であることは，次のようにして示される．(5.2)に左から $\langle q|$ を掛けて，固有ベクトル $|q\rangle$ の完全性を利用すると，(5.2)は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle q|\psi(t)\rangle = \int\langle q|\hat{H}|q'\rangle \mathrm{d}q'\langle q'|\psi(t)\rangle \tag{5.3}$$

となる．ここで $\langle q|\psi(t)\rangle=\psi(q,t)$ と書き，(1.67)により

$$\langle q|\hat{H}|q'\rangle = H_{q,q'} = H\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\delta(q-q')$$

であることに注意し，これらを(5.3)に代入すれば(5.1)がえられる．

位置表示を用いた(5.1)でも，特定の表示によらない(5.2)でも，演算子 q, p または $\hat{q}, \hat{p}$ は時間 t に依存せず，状態関数 $\psi(q,t)$ または状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ が時間的に変化する．このように，オブザーバブルは固定され，状態が時間とともに変化するとする運動の記述法を **Schrödinger 表示**という．なお，ここでの表示という言葉は，これまでのオブザーバブルのどれを最初に対角型に選ぶかという意味の表示(representation)とは全く意味が違うことに注意されたい．そこで，ここで言う表示という言葉に対しては**描像**(picture)という別の言葉を用いることもある．

さて，ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有ベクトルを $|m\rangle$ とし，その固有値を E_m と

すると，$\hat{H}|m\rangle=E_m|m\rangle$ である．そこで，(5.2)の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ を，固有ベクトル $|m\rangle$ の完全系で展開し，$a_m(t)=\langle m|\psi(t)\rangle$ と書くと

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m |m\rangle a_m(t) \tag{5.4}$$

である．これを(5.2)に代入し，左から $\langle n|$ を掛けて，直交規格化の条件 $\langle n|m\rangle=\delta_{n,m}$ を用いると，(5.2)は微分方程式

$$i\hbar \mathrm{d}a_n(t)/\mathrm{d}t = E_n a_n(t)$$

に帰着する．この方程式の一般解は

$$a_n(t) = a_n(0)\exp[-iE_n t/\hbar]$$

で与えられる．これを(5.4)に代入し，$a_m(0)=\langle m|\psi(0)\rangle$ にもどすと

$$|\psi(t)\rangle = \sum_m |m\rangle \mathrm{e}^{-iE_m t/\hbar}\langle m|\psi(0)\rangle \tag{5.5}$$

となる．ここで(2.24)のスペクトル表示を用いて

$$\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} = \sum_m |m\rangle \mathrm{e}^{-iE_m t/\hbar}\langle m| \tag{5.6}$$

と表わすと，(5.5)の解は

$$|\psi(t)\rangle = \hat{T}(t)|\psi(0)\rangle = \mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle \tag{5.7}$$

となる．ここで $\hat{T}(t)\equiv\exp[-i\hat{H}t/\hbar]$ であり，$\hat{H}$ のエルミート性によって，$\hat{T}^\dagger(t)=\exp[+i\hat{H}t/\hbar]$ となる．したがって，$\hat{T}^\dagger\hat{T}=\hat{T}\hat{T}^\dagger=1$ である．すなわち，(5.7)は状態 $|\psi(0)\rangle$ から状態 $|\psi(t)\rangle$ へのユニタリー変換であるとみなすことができる．(5.7)を(5.2)に代入し，状態ベクトル $|\psi(0)\rangle$ が任意であることを考慮すると，(5.2)の Schrödinger の方程式を演算子方程式

$$i\hbar \mathrm{d}\hat{T}(t)/\mathrm{d}t = \hat{H}\hat{T}(t) \tag{5.8}$$

として表現することもできる．

ここで1次元の自由粒子の例を考えよう．(5.7)の位置表示をとると

$$\langle q|\psi(t)\rangle = \int\langle q|\hat{T}(t)|q'\rangle\mathrm{d}q'\langle q'|\psi(0)\rangle = \int\langle q|\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|q'\rangle\mathrm{d}q'\langle q'|\psi(0)\rangle \tag{5.9}$$

となる．そこで運動量演算子 $\hat{p}$ の固有状態 $\hat{p}|p'\rangle=p'|p'\rangle$ をとり，$\hat{H}=\hat{p}^2/2m$ を用いると

$$e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \int_{-\infty}^{\infty} |p'\rangle e^{-ip'^2 t/2m\hbar} \langle p'| dp'$$

である．ここで，$\langle q|p\rangle^* = \langle p|q\rangle$ と，(2.19)を用いると

$$\begin{aligned}\langle q|e^{-i\hat{H}t/\hbar}|q'\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle q|p\rangle e^{-ip^2 t/2m\hbar} \langle p|q'\rangle dp \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{ipq/\hbar} e^{-ip^2 t/2m\hbar} e^{-ipq'/\hbar} dp \\ &= \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i t}}\, e^{-\frac{m}{2\hbar i t}(q-q')^2}\end{aligned}$$

がえられる．これを(5.9)に代入し，$\psi(q,t) = \langle q|\psi(t)\rangle$ と書くと

$$\psi(q,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dq' \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar i t}}\, e^{-\frac{m}{2\hbar i t}(q-q')^2} \psi(q',0). \qquad (5.10)$$

これが，1次元の自由粒子の場合の Schrödinger 方程式(5.1)の初期値問題の解である．

次に，任意のオブザーバブル $\hat{F}$ の状態 $|\psi(t)\rangle$ における期待値の時間依存性を調べよう．

$$\bar{F}(t) = \langle\psi(t)|\hat{F}|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q,t) F\left(q, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q,t) dq$$

を時間 t で微分し，(5.1)を用いると

$$\begin{aligned}\frac{d\bar{F}(t)}{dt} &= \int_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\partial\psi^*(q,t)}{\partial t}F\psi(q,t) + \psi^*(q,t)F\frac{\partial\psi(q,t)}{\partial t}\right]dq \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\left[\left(\frac{1}{i\hbar}H\psi(q,t)\right)^* F\psi(q,t) + \psi^*(q,t)F\cdot\frac{1}{i\hbar}H\psi(q,t)\right]dq.\end{aligned}$$

ここで H のエルミート性を利用すると

$$\frac{d\bar{F}(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q,t)[F,H]\psi(q,t) dq = \frac{1}{i\hbar}\langle\psi(t)|[\hat{F},\hat{H}]|\psi(t)\rangle \qquad (5.11)$$

となる．ここで $\hat{F}$ を単位演算子 $\hat{1}$ とすると，$[\hat{1},\hat{H}]=0$ より

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\hat{1}|\psi(t)\rangle = \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 0 \qquad (5.12)$$

である．こうして，第1章(3.12)の全確率の保存則が，粒子数に無関係に一般

の体系において成立することが示された．(5.12)の証明のポイントはハミルトニアン $\hat{H}$ のエルミート性にある．

次に $\hat{F}$ として $\hat{q}$ と $\hat{p}$ をとり，$\hat{H}=\hat{p}^2/2m+V(\hat{q})$ とすると，(3.7)と(3.8)より

$$[\hat{q},\hat{H}] = i\hbar\hat{p}/m, \qquad [\hat{p},\hat{H}] = -i\hbar\partial V(\hat{q})/\partial\hat{q}$$

がえられる．このとき(5.11)は

$$\frac{\mathrm{d}\bar{q}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m}\bar{p}(t), \qquad \frac{\mathrm{d}\bar{p}(t)}{\mathrm{d}t} = -\overline{\left(\frac{\partial V(q)}{\partial q}\right)} \tag{5.13}$$

となる．すなわち，位置と運動量の期待値は，古典力学の運動法則と似た形の方程式にしたがう．ただし，(5.13)の第2式の右辺は $-\partial V(\bar{q})/\partial\bar{q}$ ではないので，古典力学の方程式と同じものではない．この(5.13)の関係を **Ehrenfest の定理**という．

(2)　2状態系の状態間の転移

ここで(1)で与えた運動法則にもとづいて，古典力学ではみられない量子力学特有の現象である状態間の転移について説明しておこう．いまある体系，例えば水素原子を考えて，その系のハミルトニアンを $\hat{H}^{(0)}$ とする．はじめこの系が $\hat{H}^{(0)}$ のある固有状態にあり，そこに外部からの何らかの作用が加えられると，その系は他の固有状態に転移する．このとき，古典力学の場合には，系の初状態から終状態への転移の途中の過程を精細に追跡してゆくことができるが，量子力学の場合には，重ね合わせの原理によってそのような追跡は不可能であり，われわれの知りえるのは，それらの状態間の転移確率だけである．いま，外部の作用をポテンシャル $\hat{V}$ で記述すると，これを含めた全系のハミルトニアンは $\hat{H}=\hat{H}^{(0)}+\hat{V}$ で与えられる．そして，このハミルトニアン $\hat{H}$ で記述される全系の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ の時間的変動は，運動方程式(5.2)によって記述される．(5.4)では，$|\psi(t)\rangle$ を $\hat{H}$ の固有状態で展開したが，ここでは $\hat{H}^{(0)}$ の固有ベクトル $|n\rangle$ を用いて

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n |n\rangle a_n(t) \tag{5.14}$$

と展開する．その理由は，いまの目的が状態 $|\psi(t)\rangle$ において，系を $\hat{H}^{(0)}$ の固有状態 $|m\rangle$ に発見する確率 $|a_m(t)|^2$ を求めることにあるからである．(5.14)

を(5.2)に代入し，$\hat{H}^{(0)}|n\rangle = E_n^{(0)}|n\rangle$ を用い，左から $\langle m|$ を掛けると，$a_m(t)$ に関する方程式

$$i\hbar \mathrm{d}a_m(t)/\mathrm{d}t = E_m^{(0)} a_m(t) + \sum_n \langle m|\hat{V}|n\rangle a_n(t) \tag{5.15}$$

がえられる．(5.15)で $\langle m|\hat{V}|n\rangle = v\delta_{m,n}$ であれば，(5.15)はそれぞれの係数 $a_m(t)$ に関する独立な方程式に分離し，このときには，初状態が他の状態に転移することはない．状態間の転移をおこすのは，外からの作用を記述する行列 $\langle m|\hat{V}|n\rangle$ が非対角型のときである．このとき(5.15)は，一般にすべての $a_m(t)$ に関する連立微分方程式となる．とくに，$\hat{H}^{(0)}$ の固有状態 $|n\rangle$ の数が無限個あるときには，(5.15)は $a_m(t)$ に関する無限連立微分方程式となる．この事情が量子力学で厳密解を求めることを困難にし，何らかの近似的解法を採用せざるをえなくする理由である．

ここでは，量子力学における状態の転移という現象の本質を把握することをその目的としているので，$\hat{H}^{(0)}$ の固有状態が2個しかない2状態系を考えることにしよう．すなわち，

$$\hat{H}^{(0)}|1\rangle = E_1^{(0)}|1\rangle, \qquad \hat{H}^{(0)}|2\rangle = E_2^{(0)}|2\rangle\ ; \qquad E_2^{(0)} > E_1^{(0)}$$

とする．このとき(5.14)の展開は

$$|\psi(t)\rangle = |1\rangle a_1(t) + |2\rangle a_2(t)$$

となり，また外部からの相互作用の行列要素は

$$\langle 1|\hat{V}|1\rangle = \langle 2|\hat{V}|2\rangle = 0, \qquad \langle 1|\hat{V}|2\rangle = v, \qquad \langle 2|\hat{V}|1\rangle = v^*$$

で与えられるとする．ここで v とその複素共役 v^* は時間 t によらない定数であると仮定する．するとこのとき，(5.15)は

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a_1(t)}{\mathrm{d}t} = E_1^{(0)} a_1(t) + v a_2(t), \qquad i\hbar\frac{\mathrm{d}a_2(t)}{\mathrm{d}t} = E_2^{(0)} a_2(t) + v^* a_1(t) \tag{5.16}$$

となる．ここで $a_i(t) = C_i(t)\exp[-iE_i^{(0)}t/\hbar]$ $(i=1,2)$ とおくと，(5.16)は

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}C_1(t)}{\mathrm{d}t} = v\mathrm{e}^{-i\omega_0 t} C_2(t), \qquad i\hbar\frac{\mathrm{d}C_2(t)}{\mathrm{d}t} = v^*\mathrm{e}^{i\omega_0 t} C_1(t) \tag{5.17}$$

と簡単化される．ここで $\omega_0 \equiv (E_2^{(0)} - E_1^{(0)})/\hbar$ である．さて，時刻 $t=0$ において，系が低エネルギー準位 $E_1^{(0)}$ の固有状態 $|1\rangle$ にあったとする．このとき，

(5.17)の微分方程式の初期条件は，$C_1(0)=1$, $C_2(0)=0$ で与えられる．すると，(5.17)より

$$\frac{\mathrm{d}C_1}{\mathrm{d}t}(0) = 0, \qquad \frac{\mathrm{d}C_2}{\mathrm{d}t}(0) = \frac{v^*}{i\hbar} \tag{5.18}$$

となる．また，(5.17)から $C_1(t)$ を消去すると，

$$\frac{\mathrm{d}^2C_2(t)}{\mathrm{d}t^2} - i\omega_0\frac{\mathrm{d}C_2(t)}{\mathrm{d}t} + \frac{|v|^2}{\hbar^2}C_2(t) = 0. \tag{5.19}$$

この方程式の一般解を求めるために，$C_2(t)\propto\exp[i\omega t]$ とおき，これを(5.19)に代入すると，$\omega^2-\omega_0\omega-|v|^2/\hbar^2=0$ をえる．この ω に関する2次方程式の解は $\omega=(1/2)[\omega_0\pm\sqrt{\omega_0{}^2+4|v|^2/\hbar^2}]$ である．したがって，(5.19)の一般解は

$$C_2(t) = \mathrm{e}^{i\omega_0 t/2}[k_1\mathrm{e}^{i\bar{\omega}t/2}+k_2\mathrm{e}^{-i\bar{\omega}t/2}]$$

で与えられる．ここで $\bar{\omega}\equiv\sqrt{\omega_0{}^2+4|v|^2/\hbar^2}$ で，k_1 と k_2 は積分定数である．これらは，上に与えた初期条件により，$k_1=-v^*/\hbar\bar{\omega}$, $k_2=+v^*/\hbar\bar{\omega}$ と決まる．これを上の一般解に代入すると

$$C_2(t) = (-2iv^*/\hbar\bar{\omega})\mathrm{e}^{i\omega_0 t/2}\sin(\bar{\omega}t/2)$$

となる．したがって，時刻 t に系を状態 $|2\rangle$ に発見する確率は

$$|a_2(t)|^2 = |C_2(t)|^2 = \frac{4|v|^2}{(\hbar\bar{\omega})^2}\sin^2\left(\frac{\bar{\omega}t}{2}\right) \tag{5.20}$$

で与えられ，系が基底状態 $|1\rangle$ に残留している確率は

$$|a_1(t)|^2 = 1-|a_2(t)|^2 = 1-\frac{4|v|^2}{(\hbar\bar{\omega})^2}\sin^2\left(\frac{\bar{\omega}t}{2}\right) \tag{5.21}$$

である．

時刻 t における状態は，状態 $|1\rangle$ と状態 $|2\rangle$ の重ね合わせであり，系がどちらの状態にあるかを測定するまえには，系のエネルギーの値が $E_1{}^{(0)}$ と $E_2{}^{(0)}$ のどちらであるかは全く分からない．したがって，その不確定さは $\Delta E=|E_1{}^{(0)}-E_2{}^{(0)}|$ で与えられる．一方，(5.20)と(5.21)をみると，それぞれの状態にある確率は，周期 $\tau=2\pi/\bar{\omega}$ で振動する．相互作用の大きさ $|v|/\hbar$ が ω_0 に比べて小さいときには，$\bar{\omega}=\sqrt{\omega_0{}^2+4|v|^2/\hbar^2}\cong\omega_0$ と近似することができるので，$\tau\cong 2\pi/\omega_0$ としてよい．さて，時刻 t_1 における存在確率と，時刻 $t_2(>t_1)$ における存在確率の間に，観測できるほどの差異を生じるのは，時間差 $\Delta t=t_2-t_1$

が，周期 $\tau \cong 2\pi/\omega_0 = 2\pi\hbar/\Delta E$ の程度かそれよりも長いとき，つまり $\Delta t \gtrsim h/\Delta E$ のときである．したがって，エネルギーの値の不確定さ ΔE と測定時間の間隔 Δt の間には，不確定性関係

$$\Delta E \cdot \Delta t \gtrsim h \tag{5.22}$$

が成立する．すなわち，エネルギー差 ΔE が小さいときには，物理量の時間的変動はゆっくりとしており，反対にエネルギー差が大きいとき，体系は短時間に変動する．しかし，第1章(2.6)において $E = i\hbar\partial/\partial t$ とおいたとき，交換関係 $[E, t] = i\hbar$ が成立するからといって，エネルギーと時間の間に，(3.18)のような意味の不確定性関係が成立すると考えるのは誤りである．なぜなら，その場合の時間の不確定性 Δt は $\Delta t = t - \bar{t}$ で定義されるはずであるが，

$$\bar{t} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q, t)\, t\, \psi(q, t)\mathrm{d}q = t\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q, t)\psi(q, t)\mathrm{d}q = t$$

であるから，つねに $\Delta t = t - \bar{t} = 0$ であり，時間 t に関する不確定性はない．すなわち，量子力学では時間そのものはいくらでも正確に測定できるものと仮定している．それは時間変数 t が，古典力学におけると同様に，量子力学においても単なるパラメーターとして扱われ，オブザーバブルではないからである．Schrödinger 表示におけるハミルトニアン $\hat{H} = H(\hat{q}, \hat{p})$ は時間 t に無関係な演算子であり，明らかに $[t, \hat{H}] = 0$ である．なお，第1章(2.6)の $E = i\hbar\partial/\partial t$ の関係は，エネルギー固有値 E に属する固有状態に作用させたときにだけ成立する関係であって，交換関係(3.1)や運動方程式(5.8)のように任意の状態に対して成立する演算子方程式ではない．(5.22)の不確定性関係では，時刻 t_1 と時刻 t_2 のそれぞれの時刻はいくらでも正確に測定できるが，エネルギー差 $\Delta E = |E_1^{(0)} - E_2^{(0)}|$ があるために，存在確率の変化を知るには，測定のための時間間隔として少なくとも $\Delta t \sim \hbar/|E_1^{(0)} - E_2^{(0)}|$ の程度の時間が必要であることを意味しているにすぎない．

問 12　x 軸にそって，幅 Δx の拡がりをもつ波束が，群速度 v で自由運動をしている．すると，この波束が x 軸上の1点を通過する時間には，$\Delta t \sim \Delta x/v$ の不確定性がある．このときには，粒子のエネルギーの値の不確定さ ΔE と Δt の間に，$\Delta E \cdot \Delta t \sim \hbar/2$ の関係があることを，波束の位置と運動量の間の不確定性関係 $\Delta x \cdot \Delta p \sim \hbar/2$ にもとづいて証明せよ．

(3) Heisenberg の運動方程式

古典力学においては，粒子の位置と運動量は，時間 t の関数として，それぞれ $q=q(t)$，$p=p(t)$ として記述される．ところがこれまでの Schrödinger 表示の理論では，時間的に変化するのは，粒子の状態を記述する状態ベクトル，または状態関数 $\psi(q,t)$ であって，物理量を記述するオブザーバブル，例えば，位置 $\hat{q}$，運動量 $\hat{p}$ あるいはハミルトニアン $\hat{H}$ などは時間的に変化しないものとしている．しかし，この Schrödinger 表示とは異なり，オブザーバブルが時間的に変動し，状態は変化しないとする理論を展開することもできる．それがここで述べる **Heisenberg 表示**(描像)の理論である．

さて，(5.7)によると，初状態として任意の状態ベクトル $|\psi(0)\rangle$ を与えたとき，任意の時刻 t における状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ は，ユニタリー変換

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle \tag{5.23}$$

で与えられる．ここで Schrödinger 表示の任意のオブザーバブル $\hat{F}$ をとり，時刻 t における任意の状態ベクトル $|\psi_1(t)\rangle$ と $|\psi_2(t)\rangle$ ではさんだ行列要素を求めると

$$\begin{aligned}\langle\psi_1(t)|\hat{F}|\psi_2(t)\rangle &= \langle\psi_1(0)|\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi_2(0)\rangle \\ &= \langle\psi_1|\hat{F}(t)|\psi_2\rangle\end{aligned} \tag{5.24}$$

となる．ここで $|\psi_1(0)\rangle=|\psi_1\rangle$，$|\psi_2(0)\rangle=|\psi_2\rangle$ とおいた．また

$$\hat{F}(t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{5.25}$$

である．時間に依存しない状態ベクトル $|\psi\rangle=|\psi(0)\rangle$ を Heisenberg 表示の状態ベクトルといい，また(5.25)で定義される時間 t に依存する演算子 $\hat{F}(t)$ を Heisenberg 表示の演算子，あるいは略して **Heisenberg 演算子**という．これに対して，(5.25)の右辺の時間によらない演算子 $\hat{F}$ を **Schrödinger 演算子**という．

(5.25)でとくに $\hat{F}$ として，$\hat{q}$ または $\hat{p}$ をとると，Heisenberg 表示の正準演算子は，それぞれ

$$\hat{q}(t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{q}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}, \qquad \hat{p}(t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{p}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{5.26}$$

で与えられる．また，$\hat{F}=\hat{H}=H(\hat{q},\hat{p})$ とすると

$$\hat{H}(t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{H}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} = \hat{H} = H(\hat{q},\hat{p}) \tag{5.27}$$

である．ここで2番目の等号では，$\hat{H}$ は自分自身とは交換可能であることを

用いている．一方

$$\hat{H}(t) = H(\hat{q}(t), \hat{p}(t))$$

であるから

$$\hat{H} = H(\hat{q}, \hat{p}) = \hat{H}(t) = H(\hat{q}(t), \hat{p}(t)) \tag{5.28}$$

であり，ハミルトニアン $\hat{H}$ は Heisenberg 表示でも Schrödinger 表示でも同じである．また，正準交換関係も

$$[\hat{q}(t), \hat{p}(t)] = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}[\hat{q}, \hat{p}]\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} = i\hbar\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} = i\hbar \tag{5.29}$$

であり，その形は不変である．したがって，(5.23)のユニタリー変換は正準変換である．

ここで，Heisenberg 演算子 $\hat{F}(t)$ のみたす方程式を求めよう．(5.25)を時間 t で微分し，$\hat{F}$ と $\hat{H}$ の順序に気をつけると，

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\hat{F}(t)}{\mathrm{d}t} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}] = \frac{i}{\hbar}\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}(\hat{H}\hat{F}-\hat{F}\hat{H})\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} \\ &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t), H(\hat{q}(t), \hat{p}(t))]\end{aligned}$$

をえる．したがって

$$i\hbar\mathrm{d}\hat{F}(t)/\mathrm{d}t = [\hat{F}(t), \hat{H}] \tag{5.30}$$

である．この演算子方程式を **Heisenberg の運動方程式**という．これは，Heisenberg 表示のオブザーバブルの時間的変動を規定する運動方程式であり，Schrödinger 表示における運動方程式(5.2)と同等の方程式である．

ここで，$\hat{F}(t)$ として $\hat{H}(t)$ そのものをとると，

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{H}(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{H}(t), \hat{H}(t)] = 0 \tag{5.31}$$

をえる．これは全系のエネルギーの保存則にほかならない．

つぎに，$\hat{F}(t)$ として $\hat{q}(t)$ および $\hat{p}(t)$ をとると，(5.30)は

$$\frac{\mathrm{d}\hat{q}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}(t), \hat{H}], \qquad \frac{\mathrm{d}\hat{p}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}(t), \hat{H}] \tag{5.32}$$

となる．ここで

$$\hat{H} = \hat{p}^2(t)/2m + V(\hat{q}(t)) \tag{5.33}$$

とし，(5.29)の交換関係と，(3.7)および(3.8)を利用すると

$$[\hat{q}(t), \hat{H}] = i\hbar\hat{p}(t)/m, \qquad [\hat{p}(t), \hat{H}] = -i\hbar\frac{\partial V(\hat{q}(t))}{\partial\hat{q}(t)}$$

がえられる．これを(5.32)の右辺に代入すると

$$\frac{\mathrm{d}\hat{q}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{m}\hat{p}(t), \qquad \frac{\mathrm{d}\hat{p}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial V(\hat{q}(t))}{\partial\hat{q}(t)} \tag{5.34}$$

と書くことができる．$\hat{q}(t)$ と $\hat{p}(t)$ が演算子であることを別にすれば，これらの方程式の形は古典力学における運動方程式そのものである．すなわち，古典力学には現われてこない状態ベクトルまたは状態関数の時間依存性により，物理系の運動を記述する Schrödinger 表示の理論よりも，オブザーバブルに時間依存性をもたせる Heisenberg 表示の理論のほうが，形式的には古典力学とのより直接的な対応関係をもっている．

ここで簡単な例題をとり，(5.33)で $\hat{V}=-f\hat{q}(t)$ としてみよう．ここで f は定数である．このとき，(5.34)は

$$\mathrm{d}\hat{q}(t)/\mathrm{d}t = \hat{p}(t)/m, \qquad \mathrm{d}\hat{p}(t)/\mathrm{d}t = f$$

である．そこで初期値として，時刻 $t=0$ で $\hat{q}$ と $\hat{p}$ を与えたとして，上の方程式を解くと

$$\hat{q}(t) = \hat{q}+(\hat{p}/m)t+(f/2m)t^2, \qquad \hat{p}(t) = \hat{p}+ft \tag{5.35}$$

となる．このとき，$\hat{q}$ と $\hat{p}$ は交換不能であるから，$\hat{q}$ と $\hat{p}$ の値を同時に決定することはできない．仮に $\hat{q}$ の値を決めたとすると，$\hat{p}$ の値は完全に不確定である．したがって(5.35)より，時刻 t においては，運動量 $\hat{p}(t)$ だけでなく，粒子の位置 $\hat{q}(t)$ もまた分からなくなってしまう．ここで，任意の Heisenberg 表示の状態 $|\psi\rangle$ における期待値

$$\bar{q}(t) = \langle\psi|\hat{q}(t)|\psi\rangle, \qquad \bar{p}(t) = \langle\psi|\hat{p}(t)|\psi\rangle$$

をとれば，(5.35)は

$$\bar{q}(t) = \bar{q}+(\bar{p}/m)t+(f/2m)t^2, \qquad \bar{p}(t) = \bar{p}+ft$$

となる．これが古典力学の解に対応する．なお，異なる時刻における Heisenberg 演算子は一般に交換不能である．例えば，(5.35)の場合

$$\begin{aligned}[\hat{q}(t), \hat{q}(t')] &= [\hat{q}+(\hat{p}/m)t+(f/2m)t^2,\ \hat{q}+(\hat{p}/m)t'+(f/2m)t'^2] \\ &= [\hat{q}, \hat{p}](t'/m)+[\hat{p}, \hat{q}](t/m) = i\hbar(t'-t)/m \end{aligned} \tag{5.36}$$

となるからである．

次に Heisenberg 演算子 $\hat{F}(t)$ を，$\hat{H}$ の固有状態 $|m\rangle$ ではさんだ行列要素を調べよう．このとき

$$\begin{aligned}\langle m|\hat{F}(t)|n\rangle &= \langle m|e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}e^{-i\hat{H}t/\hbar}|n\rangle \\ &= e^{-i(E_n-E_m)t/\hbar}\langle m|\hat{F}|n\rangle = e^{-i\omega_{n,m}t}\langle m|\hat{F}|n\rangle. \qquad (5.37)\end{aligned}$$

ここで $\omega_{n,m}=(E_n-E_m)/\hbar$ である．(5.37)より，すべての Heisenberg 演算子のエネルギー表示での行列要素は，その体系のいかんにかかわらず，(5.37)で示される振動解で表わされる．これが Heisenberg の行列力学の本質である．古典力学における原子の振動子模型が，Rutherford の太陽系型の原子模型と全く似ても似つかない模型であるにもかかわらず，原子の性質を定性的に説明することに成功した原因はここにある．なお，調和振動子の場合には，(5.37)の角振動数 $\omega_{n,m}$ がその固有角振動数 ω_0 の整数倍 $(n-m)\omega_0$ で与えられる．これが調和振動子の特徴である．

最後に，時間的に変動する Heisenberg 演算子の固有状態について述べておこう．いま，Schrödinger 演算子 $\hat{F}$ の固有状態を $\hat{F}|n\rangle=f_n|n\rangle$ で定義し，これに $\exp[i\hat{H}t/\hbar]$ を作用させた状態

$$e^{+i\hat{H}t/\hbar}|n\rangle$$

を考える．このとき，

$$\begin{aligned}\hat{F}(t)e^{i\hat{H}t/\hbar}|n\rangle &= e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}e^{-i\hat{H}t/\hbar}\cdot e^{i\hat{H}t/\hbar}|n\rangle \\ &= e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}|n\rangle = f_n e^{i\hat{H}t/\hbar}|n\rangle \qquad (5.38)\end{aligned}$$

となる．すなわち，状態 $e^{i\hat{H}t/\hbar}|n\rangle$ は，Heisenberg 演算子 $\hat{F}(t)$ が，固有値 f_n をもつ状態である．そこで

$$|\hat{F}(t)=f_n\rangle \equiv e^{i\hat{H}t/\hbar}|n\rangle \qquad (5.39)$$

と定義すると，状態ベクトル $|\hat{F}(t)=f_n\rangle$ は方程式

$$-i\hbar\frac{d}{dt}|\hat{F}(t)=f_n\rangle = \hat{H}|\hat{F}(t)=f_n\rangle \qquad (5.40)$$

をみたす．すなわち，Heisenberg 演算子の固有状態のみたす方程式は，Schrödinger の方程式(5.2)の左辺の符号を変えたものである．なお，(5.39)より

$$\langle\hat{F}(t)=f_n|\hat{F}(t')=f_m\rangle = \langle n|e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar}|m\rangle \qquad (5.41)$$

であるから，これは，時刻 t' に系が状態 $|m\rangle$ にあったとき，時刻 t に状態

$|n\rangle$ に転移する確率振幅にほかならない．(5.41)の表式は，最近の場の理論でよく利用される Feynman による経路積分法の出発点となる表式である．

問 13　ユニタリー演算子 $\hat{U}(t)$ の逆演算子の時間微分は

$$\frac{\mathrm{d}\hat{U}^{-1}}{\mathrm{d}t} = -\hat{U}^{-1}\frac{\mathrm{d}\hat{U}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{-1} \tag{5.42}$$

であることを示せ．

問 14　$[\hat{A},\hat{B}]\neq 0$ のとき，次の公式を証明せよ．

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{A}} = \hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]+\frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+\frac{1}{3!}[\hat{A},[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]]+\cdots \tag{5.43}$$

問 15　交換子 $[\hat{A},\hat{B}]$ が c 数であるとき，

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\cdot\mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]/2} \tag{5.44}$$

を証明せよ．

(4)　Tomonaga-Schwinger の方程式

この節の(2)の例で経験したように，量子力学においては，全系のハミルトニアン $\hat{H}$ を二つの部分 $\hat{H}^{(0)}$ と $\hat{V}$ に分割し，$\hat{H}^{(0)}$ の固有状態が相互作用 $\hat{V}$ の作用により，$\hat{H}^{(0)}$ の他の固有状態に転移する確率を求めるという形で問題が設定されることが多い．そこで以下では，$\hat{H}^{(0)}$ を自由ハミルトニアン，$\hat{V}$ を相互作用ハミルトニアンと名づけることにする．ここで，Schrödinger 表示の自由ハミルトニアン $\hat{H}^{(0)}$ を用いて，Schrödinger 表示の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ を次のように変換する．

$$|\psi_I(t)\rangle = \mathrm{e}^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}|\psi(t)\rangle. \tag{5.45}$$

この変換もまた，(5.23)と同様にユニタリー変換である．(5.45)で定義される新しい状態ベクトル $|\psi_I(t)\rangle$ のみたす運動方程式は，次に示すように

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi_I(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{V}_I(t)|\psi_I(t)\rangle \tag{5.46}$$

で与えられる．ここで，右辺の $\hat{V}_I(t)$ は

$$\hat{V}_I(t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\hat{V}\mathrm{e}^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \tag{5.47}$$

で定義される演算子である．(5.46)の方程式は，(5.2)を用いて次のようにしてえられる．(5.45)を t で微分し，一般に $\hat{H}^{(0)}$ と $\hat{V}$ が交換不能であることに

注意すると

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi_I(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = i\hbar\left[\frac{i}{\hbar}\hat{H}^{(0)}\mathrm{e}^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}|\psi(t)\rangle+\mathrm{e}^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\frac{\mathrm{d}|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t}\right]$$
$$= -\hat{H}^{(0)}|\psi_I(t)\rangle+\mathrm{e}^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}(\hat{H}^{(0)}+\hat{V})\mathrm{e}^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}|\psi_I(t)\rangle$$
$$= \hat{V}_I(t)|\psi_I(t)\rangle$$

となる．(5.46)の方程式を**Tomonaga-Schwingerの方程式**といい*，この新しい表示を**相互作用表示**という．それは，この表示では，状態ベクトル $|\psi_I(t)\rangle$ の時間的変動を与えるのが相互作用 $\hat{V}_I(t)$ だからである．

相互作用表示の演算子のみたす運動方程式を求めるために，任意のSchrödinger演算子 $\hat{F}$ の行列要素をとり，(5.45)の逆変換を利用して，次のように変換する．

$$\langle\psi^{(1)}(t)|\hat{F}|\psi^{(2)}(t)\rangle = \langle\psi_I{}^{(1)}(t)|\mathrm{e}^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\hat{F}\mathrm{e}^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}|\psi_I{}^{(2)}(t)\rangle$$
$$= \langle\psi_I{}^{(1)}(t)|\hat{F}_I(t)|\psi_I{}^{(2)}(t)\rangle.$$

ここで

$$\hat{F}_I(t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\hat{F}\mathrm{e}^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar} \tag{5.48}$$

である．(5.48)を微分すると，$\hat{F}_I(t)$ のみたす運動方程式として

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{F}_I(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{F}_I(t), \hat{H}^{(0)}] \tag{5.49}$$

がえられる．すなわち，相互作用表示における演算子は自由ハミルトニアン $\hat{H}^{(0)}$ の作用のもとで変動する．なお，(5.48)でとくに $\hat{F}=\hat{H}^{(0)}$ ととると，$\hat{H}^{(0)}$ どうしは交換可能であるから，$\hat{H}_I{}^{(0)}(t)=\hat{H}^{(0)}$ となる．したがって

$$H^{(0)}(\hat{q}_I(t), \hat{p}_I(t)) = H^{(0)}(\hat{q}, \hat{p})$$

である．このとき，全系のハミルトニアン $\hat{H}=\hat{H}^{(0)}+\hat{V}$ のなかの $\hat{q}$ と $\hat{p}$ を，相互作用表示の演算子 $\hat{q}_I(t)$ と $\hat{p}_I(t)$ におきかえてつくったハミルトニアン

$$\hat{H}_I(t) \equiv H_0(\hat{q}_I(t), \hat{p}_I(t)) + V(\hat{q}_I(t))$$

は，全系のエネルギーを与えないことに注意しよう．これを，(5.49)に代入しても

---

* 正確には，Tomonaga-Schwingerの方程式は，(5.46)を相対論的に不変な形式に書き直したものをいう．しかし，それは本質的には(5.46)と同じものなので，本書では(5.46)をもってTomonaga-Schwingerの方程式ということにする．

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{H}_I(t)}{\mathrm{d}t}=[\hat{H}_I(t),\hat{H}^{(0)}]\neq 0$$

で，$\hat{H}_I(t)$ は保存しない．全系のエネルギーを与えるのは，Heisenberg 演算子または Schrödinger 演算子で表わした

$$H_0(\hat{q}(t),\hat{p}(t))+V(\hat{q}(t))=H_0(\hat{q},\hat{p})+V(\hat{q})$$

である．これは当然のことである．なぜなら，例えば調和振動子のハミルトニアンに，自由粒子の解を代入しても，系のエネルギーになるはずはないからである．全系のエネルギーを相互作用表示の演算子で表わしたら，それは極めて複雑な形になってしまう．

相互作用表示での正準演算子 $\hat{q}_I(t)$ と $\hat{p}_I(t)$ のみたす交換関係は

$$[\hat{q}_I(t),\hat{p}_I(t)]=\mathrm{e}^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}[\hat{q},\hat{p}]\mathrm{e}^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}=i\hbar \tag{5.50}$$

となるから，(5.45)の変換もまた正準変換である．しかし，Heisenberg 演算子のときと同様に，異なる時刻における 2 個の相互作用表示の演算子は一般に交換可能ではない．Heisenberg 演算子の場合には，相互作用の形がよほど簡単なものでないかぎり，その運動方程式(5.30)を解くことは不可能である．これに対して，自由ハミルトニアン $\hat{H}^{(0)}$ に支配される(5.49)の運動方程式は簡単に解くことができる．そのため，異なる時刻の演算子間の交換関係，例えば $[\hat{q}_I(t),\hat{q}_I(t')]$ を簡単に求めることができる．周知のように，同時刻という概念は相対論的に不変な概念ではない．したがって，同時刻で設定されている正準交換関係は，明示的には相対論的に不変な形をもたない．Tomonaga は，交換関係を相対論的に不変な形で設定するために，ここで説明した相互作用表示を利用し，そうすることにより，場の量子論を相対論的不変な形に定式化することに成功したのである．

正準変換(5.23)により，Schrödinger 表示から Heisenberg 表示に，また(5.45)によって，Schrödinger 表示から相互作用表示に変換された．それでは Heisenberg 表示と相互作用表示の間にはどのような関係があるだろうか．(5.48)の逆変換

$$\hat{F}=\mathrm{e}^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\hat{F}_I(t)\mathrm{e}^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}$$

を，(5.25)に代入すると，

$$\hat{F}(t)=\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\mathrm{e}^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\hat{F}_I(t)\mathrm{e}^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{5.51}$$

となる．また Heisenberg 表示の状態ベクトル $|\psi\rangle$ と相互作用表示の状態ベクトル $|\psi_I(t)\rangle$ の間には，(5.23)と(5.45)より

$$|\psi\rangle = e^{i\hat{H}t/\hbar}|\psi(t)\rangle = e^{i\hat{H}t/\hbar}\cdot e^{-i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}|\psi_I(t)\rangle$$

の関係がある．したがって，

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\cdot e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle \tag{5.52}$$

である．すなわち，全ハミルトニアン $\hat{H}$ によって生成された Schrödinger 表示の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ から，自由ハミルトニアン $\hat{H}^{(0)}$ によって変化する分だけ引きもどすことによって，相互作用表示の状態ベクトル $|\psi_I(t)\rangle$ がつくられる．

ここで時刻 t' と時刻 t における相互作用表示の状態をつなぐ変換を

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}(t,t')|\psi_I(t')\rangle \tag{5.53}$$

と表わす．この変換の演算子 $\hat{U}(t,t')$ を求めるために，(5.52)を(5.53)の両辺に代入すると

$$e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\cdot e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle = \hat{U}(t,t')e^{i\hat{H}^{(0)}t'/\hbar}\cdot e^{-i\hat{H}t'/\hbar}|\psi\rangle$$

となる．ここで $|\psi\rangle$ は任意の状態であることに注意すると，

$$\hat{U}(t,t') = e^{i\hat{H}^{(0)}t/\hbar}\cdot e^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar}\cdot e^{-i\hat{H}^{(0)}t'/\hbar} \tag{5.54}$$

がえられる．これは，相互作用表示の状態ベクトルの時間的発展を記述する変換 $\hat{U}(t,t')$ を，Schrödinger 表示のハミルトニアン $\hat{H}$ と $\hat{H}^{(0)}$ で表現したものである．なおこのとき，一般に $\hat{H}$ と $\hat{H}^{(0)}$ とは交換不能であり，したがってこのときには，(5.54)の指数関数の順序を勝手にいれかえてはならない．さて，(5.54)から

$$\begin{aligned} &\hat{U}(t,t) = 1, \\ &\hat{U}(t,t'') = \hat{U}(t,t')\cdot\hat{U}(t',t''), \\ &\hat{U}^\dagger(t',t) = \hat{U}(t,t'), \\ &\hat{U}^\dagger(t,t')\cdot\hat{U}(t,t') = \hat{U}(t,t')\cdot\hat{U}^\dagger(t,t') = 1 \end{aligned} \tag{5.55}$$

が成立することを確かめることができる．すなわち，変換 $\hat{U}$ はユニタリー変換であり，この変換の全体は群を構成する．(5.53)を(5.46)に代入し，状態 $|\psi_I(t')\rangle$ が任意であることに注意すると，変換 $\hat{U}(t,t')$ は演算子方程式

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,t')}{\partial t} = \hat{V}_I(t)\hat{U}(t,t') \tag{5.56}$$

をみたすことが分かる．(5.55)の第1式から $\hat{U}(t',t')=1$ であることを用いると，(5.56)は積分方程式の形で

$$\hat{U}(t,t') = 1-\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t''\,\hat{V}_I(t'')\hat{U}(t'',t') \qquad (5.57)$$

と表わされる．(5.57)を逐次に展開すれば

$$\hat{U}(t,t') = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t'}^{t_1}\mathrm{d}t_2\cdots\int_{t'}^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\,\hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2)\cdots\hat{V}_I(t_n) \qquad (5.58)$$

となる．これは，変換 $\hat{U}(t,t')$ を相互作用表示の演算子 $\hat{V}_I(t)$ で表現したものである．このとき，異なる時刻における $\hat{V}_I(t)$ は一般に交換不能であり，そのため(5.58)の右辺の演算子の順序を勝手にいれかえることはできない．

次に，(5.53)を時間 t' で微分したらどうなるであろうか．このとき，

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}|\psi_I(t)\rangle = 0 &= i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,t')}{\partial t'}|\psi_I(t')\rangle + i\hbar\hat{U}(t,t')\frac{\partial}{\partial t'}|\psi_I(t')\rangle \\ &= i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,t')}{\partial t'}|\psi_I(t')\rangle + \hat{U}(t,t')\hat{V}_I(t')|\psi_I(t')\rangle \end{aligned}$$

であるから，

$$i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,t')}{\partial t'} = -\hat{U}(t,t')\hat{V}_I(t') \qquad (5.59)$$

となる．この方程式を積分形に変えると

$$\hat{U}(t,t') = 1-\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}\mathrm{d}t''\,\hat{U}(t,t'')\hat{V}_I(t'') \qquad (5.60)$$

である．

さて，変換 $\hat{U}$ を用いると，相互作用表示と Heisenberg 表示とを結ぶ変換(5.52)と(5.51)は，それぞれ

$$|\psi\rangle = \hat{U}(0,t)|\psi_I(t)\rangle, \qquad \hat{F}(t) = \hat{U}(0,t)\hat{F}_I(t)\hat{U}(t,0) \qquad (5.61)$$

と表わされる．(5.61)の第2式の右辺に，(5.58)の展開式を代入すると，Heisenberg 表示の演算子 $\hat{F}(t)$ を相互作用表示の演算子 $\hat{F}_I(t)$ を用いて，次のように表わすことができる(問16参照)．

$$
\begin{aligned}
\hat{F}(t) = \hat{F}_I(t) &+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_0^t \mathrm{d}t_1 [\hat{F}_I(t), \hat{V}_I(t_1)] \\
&+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 [[\hat{F}_I(t), \hat{V}_I(t_1)], \hat{V}_I(t_2)] \\
&+ \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^3 \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \int_0^{t_2} \mathrm{d}t_3 [[[\hat{F}_I(t), \hat{V}_I(t_1)], \hat{V}_I(t_2)], \hat{V}_I(t_3)] \\
&+ \cdots.
\end{aligned}
\tag{5.62}
$$

相互作用表示の演算子 $\hat{F}_I(t)$ は，自由ハミルトニアン $\hat{H}^{(0)}$ の支配下にあり，したがって，それは相互作用 $\hat{V}$ の影響をうけていない．それに対して，Heisenberg 演算子 $\hat{F}(t)$ は，(5.62)の展開式からも知られるように，相互作用の効果を全面的に含んでいる．そこで，相互作用表示の演算子を**裸の演算子**といい，また Heisenberg 演算子を相互作用の**着物を着た演算子**という．なお，Schrödinger 演算子の場合には，相互作用の影響はすべて状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ のなかに含まれていて，演算子は相互作用の効果を全く含んでいない．

最後に，本書では，すべての表示を $t=0$ で一致させているが，文献によっては，その時刻を $t=-\infty$ にとっているものがあるから注意されたい．

問 16　(5.62)に与えた展開式を導出せよ．

§6　変位演算子と運動量

運動量という物理量は，空間座標の原点のずらしと深い関係をもっている．いま物理系を記述する座標系を，図 2.2 のように，一定のベクトル $\boldsymbol{a}$ だけ平行移動したとする．このとき，原点を O とする元の座標系からみた P 点の座標 $\boldsymbol{r}$ と，原点を O′ とする新座標系からみた同一点 P の座標 $\boldsymbol{r}'$ の間には

$$\boldsymbol{r} \longrightarrow \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r}-\boldsymbol{a} \tag{6.1}$$

の関係がある．ここで系を記述する状態関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ を，新座標系の変数 $\boldsymbol{r}'$ を用いて表わすと

$$\psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r}'+\boldsymbol{a}, t) = \psi'(\boldsymbol{r}', t) \tag{6.2}$$

となる．ここで右辺の ψ' は，$\boldsymbol{r}$ の関数を $\boldsymbol{r}'$ を変数とする関数に書き直したことによる関数形の変化を示すものである．そこで，この関数形の変化に目をつけて，図 2.2 の P 点における関数値 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ と，新座標系でその座標値が同じ

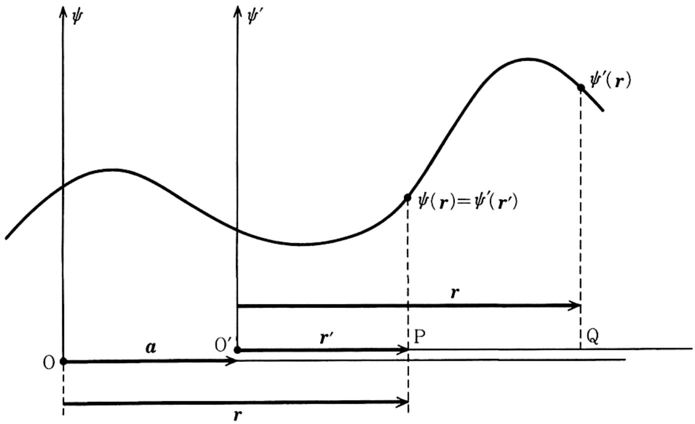


図 2.2　座標系の平行移動

$\boldsymbol{r}$ で与えられる別の点 Q における関数値 $\psi'(\boldsymbol{r}, t)$ の間に

$$\psi'(\boldsymbol{r}, t) = D\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{6.3}$$

の関係があるものとする．ここで D は関数 ψ を ψ' に変える演算子である．この変換の演算子 D を決めるために，ベクトル $\boldsymbol{a}$ を無限小ベクトル $\boldsymbol{\varepsilon}$ におきかえたときの無限小変換 D_{ε} を考えよう．このとき(6.2)より

$$\psi'(\boldsymbol{r}', t) = \psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r}'+\boldsymbol{\varepsilon}, t) = \psi(\boldsymbol{r}', t)+\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\nabla'\psi(\boldsymbol{r}', t)$$

となる．ここで変数 $\boldsymbol{r}'$ を $\boldsymbol{r}$ と書き変えると

$$\psi'(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r}, t)+\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\nabla\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{6.4}$$

である．これを $\psi'(\boldsymbol{r}, t)=D_{\varepsilon}\psi(\boldsymbol{r}, t)$ と比較すると，無限小変換の演算子は

$$D_{\varepsilon} = 1+\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\nabla = 1+(i/\hbar)\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{p} \tag{6.5}$$

で与えられる．ここで $\boldsymbol{p}$ は，$\boldsymbol{p}=(\hbar/i)\nabla$ で与えられる運動量演算子である．これは任意の状態関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ に作用する演算子であるが，これを状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ に作用する演算子に直せば

$$\hat{D}_{\varepsilon} = 1+(i/\hbar)\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \tag{6.6}$$

と表わされる．運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}$ はエルミート演算子であるから，(6.6)のエルミート共役演算子は

$$\hat{D}_{\varepsilon}^{\dagger} = 1-(i/\hbar)\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \tag{6.7}$$

である．ここで $\boldsymbol{a}=n\boldsymbol{\varepsilon}$ とおき，$\boldsymbol{a}$ を有限に保ちながら $n\to\infty$ の極限をとると

$$\hat{D} = \lim_{n\to\infty}\left(1+\frac{i}{\hbar n}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}\right)^n = \mathrm{e}^{i\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar} \tag{6.8}$$

をえる．この $\hat{D}$ を**変位演算子**という．同様にして

$$\hat{D}^\dagger = \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar} \tag{6.9}$$

である．(6.8)と(6.9)より

$$\hat{D}^\dagger\cdot\hat{D} = \hat{D}\cdot\hat{D}^\dagger = 1$$

となるから，変換 $\hat{D}$ はユニタリー変換である．

さて，ユニタリー変換

$$|\psi'\rangle = \hat{D}|\psi\rangle \tag{6.10}$$

に伴って，オブザーバブル $\hat{F}$ の期待値は

$$\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle = \langle\psi'|\hat{D}\hat{F}\hat{D}^\dagger|\psi'\rangle$$

となるから，この変換のもとで，正準演算子 $\hat{\boldsymbol{q}}$ と $\hat{\boldsymbol{p}}$ は

$$\begin{aligned}\hat{D}\hat{\boldsymbol{q}}\hat{D}^\dagger &= \mathrm{e}^{i\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar}\hat{\boldsymbol{q}}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar}\\ &= \hat{\boldsymbol{q}}+[i\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar, \boldsymbol{q}]+\frac{1}{2!}[i\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar, [i\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar, \hat{\boldsymbol{q}}]]+\cdots\\ &= \hat{\boldsymbol{q}}+\boldsymbol{a},\\ \hat{D}\hat{\boldsymbol{p}}\hat{D}^\dagger &= \mathrm{e}^{i\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar}\hat{\boldsymbol{p}}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}/\hbar} = \hat{\boldsymbol{p}}\end{aligned} \tag{6.11}$$

と変換される．ここで公式(5.43)を利用している．したがって，系のハミルトニアン $\hat{H}=H(\hat{\boldsymbol{q}},\hat{\boldsymbol{p}})$ は，一般に

$$\hat{D}H(\hat{\boldsymbol{q}},\hat{\boldsymbol{p}})\hat{D}^\dagger = H(\hat{\boldsymbol{q}}+\boldsymbol{a},\hat{\boldsymbol{p}}) \tag{6.12}$$

と変換される．ところが，系の物理的性質を規定するハミルトニアン $\hat{H}$ が座標系のずらしに対して不変のとき，すなわち

$$H(\hat{\boldsymbol{q}}+\boldsymbol{a},\hat{\boldsymbol{p}}) = H(\hat{\boldsymbol{q}},\hat{\boldsymbol{p}}) \tag{6.13}$$

が成立するときには，(6.12)は

$$[\hat{D},\hat{H}] = 0$$

となり，したがって

$$[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}] = 0 \tag{6.14}$$

である．これまでの話はSchrödinger表示での話であったが，この(6.14)をHeisenberg表示に変換すれば，$[\hat{\boldsymbol{p}}(t),\hat{H}]=0$ となる．すると，(5.30)のHeisenbergの方程式により

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{p}}(t)}{\mathrm{d}t}=[\hat{\boldsymbol{p}}(t),\hat{H}]=0 \tag{6.15}$$

がえられ，運動量 $\hat{\boldsymbol{p}}(t)$ が保存することが結論される．

以上の議論をまとめると，系のハミルトニアン $\hat{H}$ が，座標系のずらしに対して不変のとき，その系の運動量が保存される．なお，(5.27)の

$$\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{H}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}=\hat{H}$$

もまた，時間座標のずらしに対するハミルトニアン $\hat{H}$ の不変性を示すものとみることができる．そして，この不変性により，(5.31)のエネルギー保存則がえられる．同様のことが，角運動量についても成立するが，これについては第4章§2で詳しく説明する．

§7　密度行列

この章の§1(6)で述べたように，同時測定の可能なオブザーバブルの完全系の同時固有状態をとることによって，量子力学的状態は完全に決定される．また，これらの固有状態の任意の重ね合わせでつくられる状態もまたひとつの完全な量子力学的状態である．このような状態を**純粋状態**という．これに対して，原理的には測定可能であるにもかかわらず，その測定が不完全であるために，状態が純粋状態の混合で表わされ，その状態を構成する純粋状態に発見される確率が，量子力学的な意味の原理的な確率とは別種の統計的な確率法則で与えられているとき，その状態を**混合状態**という．すなわち，純粋状態 $|\psi_n\rangle$ に対するオブザーバブル $\hat{F}$ の期待値 $\bar{F}$ が $\langle\psi_n|\hat{F}|\psi_n\rangle$ で与えられるのに対して，混合状態における $\hat{F}$ の統計的平均値 $\langle\!\langle F\rangle\!\rangle$ は，純粋状態に対する期待値 $\langle\psi_n|\hat{F}|\psi_n\rangle$ に統計的な重み P_n をつけて

$$\langle\!\langle F\rangle\!\rangle=\sum_n P_n\langle\psi_n|\hat{F}|\psi_n\rangle \tag{7.1}$$

で与えられる．

例えば，10^{24} 個の程度の多数の原子からなる系を考え，その系が熱平衡状態にあるとしよう．このようなときでも，原理的には，系を構成するすべての原子の状態を完全に指定することは可能である．しかし実際問題としては，系を構成する各原子の状態を測定によって知ることは不可能である．このとき，原

子系の状態は混合状態とみなすことができ，(7.1)のP_nとしては統計力学のBoltzmann因子が採用される．

さて，任意の完全系$\{|m\rangle\}$をとり，これを(7.1)の右辺に挿入すると，

$$\begin{aligned}\langle\!\langle F\rangle\!\rangle &= \sum_n P_n\langle\psi_n|\hat{F}|m\rangle\langle m|\psi_n\rangle = \sum_{n,m}\langle m|\psi_n\rangle P_n\langle\psi_n|\hat{F}|m\rangle \\ &= \sum_m\langle m|\hat{\rho}\hat{F}|m\rangle = \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{F}) \qquad (7.2)\end{aligned}$$

と表わされる．ここで$\hat{\rho}$は

$$\hat{\rho} = \sum_n |\psi_n\rangle P_n\langle\psi_n| \qquad (7.3)$$

で定義されるエルミート演算子であり，これを**密度演算子**という．(7.2)の最後の記号trは英語のtraceの略であり，それは任意の完全系でつくった行列の対角和を意味する．すなわち，オブザーバブル$\hat{F}$の混合状態に対する統計的平均値$\langle\!\langle F\rangle\!\rangle$は，$\hat{\rho}$と$\hat{F}$の積を任意の完全系で表わした行列の対角和で与えられる．

さて，密度演算子$\hat{\rho}$の固有値をρ'とし，その規格化された固有ベクトルを$|\rho'\rangle$とすると，$\hat{\rho}|\rho'\rangle=\rho'|\rho'\rangle$である．このとき，

$$\langle\rho'|\hat{\rho}|\rho'\rangle = \sum_n\langle\rho'|\psi_n\rangle P_n\langle\psi_n|\rho'\rangle = \sum_n P_n|\langle\psi_n|\rho'\rangle|^2 = \rho' \qquad (7.4)$$

である．統計因子P_nはつねに正であるから，(7.4)より$\rho'\geqq 0$，すなわち密度演算子の固有値は正または0である．(7.3)の行列要素

$$\rho_{m,n} = \langle m|\hat{\rho}|n\rangle = \sum_l\langle m|\psi_l\rangle P_l\langle\psi_l|n\rangle \qquad (7.5)$$

を**密度行列**という．一方，(7.3)は(7.5)を用いて

$$\hat{\rho} = \sum_{n,m,l}|m\rangle\langle m|\psi_l\rangle P_l\langle\psi_l|n\rangle\langle n| = \sum_{n,m}|m\rangle\rho_{m,n}\langle n| \qquad (7.6)$$

と表わすこともできる．

密度演算子は，混合状態だけでなく，純粋状態に対しても定義することができる．いま，規格化された任意の純粋状態$|\psi\rangle$をとり，この状態に対する密度演算子を

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi| \qquad (7.7)$$

で定義する．このとき

$$\hat{\rho}^2 = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = \hat{\rho} \tag{7.8}$$

である．この関係は，純粋状態の密度演算子に対してのみ成立し，混合状態の密度演算子のときには成立しない．(7.7)の密度演算子の場合には，(7.2)は

$$\begin{aligned}\langle\!\langle F\rangle\!\rangle = \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{F}) &= \sum_m \langle m|\hat{\rho}\hat{F}|m\rangle = \sum_m \langle m|\psi\rangle\langle\psi|\hat{F}|m\rangle \\ &= \sum_m \langle\psi|\hat{F}|m\rangle\langle m|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle = \bar{F}\end{aligned} \tag{7.9}$$

となる．すなわちこのとき，統計的平均値$\langle\!\langle F\rangle\!\rangle$は量子力学的期待値$\bar{F}$に一致する．また，(7.9)の$|\psi\rangle$として，$\hat{F}|n\rangle=f_n|n\rangle$で与えられる$\hat{F}$の固有状態$|n\rangle$を選ぶと，

$$\langle\!\langle F\rangle\!\rangle = \bar{F} = \langle n|\hat{F}|n\rangle = f_n \tag{7.10}$$

となる．

次に，$|\psi\rangle=\sum_n |n\rangle\langle n|\psi\rangle$と展開し，$C_n=\langle n|\psi\rangle$とおくと，(7.7)は

$$\hat{\rho} = \sum_{m,n} |m\rangle\langle m|\psi\rangle\langle\psi|n\rangle\langle n| = \sum_{m,n} |m\rangle C_m C_n^*\langle n|$$

となり，$\hat{\rho}$の行列要素は

$$\rho_{m,n} = C_m C_n^* \tag{7.11}$$

と表わされる．とくに(7.11)の対角要素

$$\rho_{n,n} = C_n C_n^* = |\langle n|\psi\rangle|^2 \tag{7.12}$$

は，状態$|\psi\rangle$から，状態$|n\rangle$への転移確率を与える．

以上の結果から，密度演算子の効用として，次の3点をあげることができる．その第1は，密度演算子$\hat{\rho}$を与えさえすれば，物理的に測定可能な量がすべて求められることである．すなわち，(7.9)により物理量の期待値がえられ，(7.10)によりその固有値が求まり，また(7.12)により，状態間の転移確率を求めることができる．さらに(7.2)により，混合状態における平均値が求まる．第2の利点は，(7.2)と(7.9)にみるように，純粋状態か混合状態かにかかわらず，その平均値が同じ公式

$$\langle\!\langle F\rangle\!\rangle = \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{F})$$

にもとづいて計算することができることである．第3の利点は，状態関数$|\psi\rangle$には位相の不定性があるが，(7.3)や(7.7)では，$|\psi\rangle$と$\langle\psi|$の位相が相殺し，

したがって，密度演算子には位相の不定性がないことである．そのため，物理量の計算過程で，状態関数の位相の不定性にわずらわされることがない．

最後に，密度演算子の時間依存性を調べておこう．系の状態ベクトルが時間的に変動する $|\psi_n(t)\rangle$ で表わされるとき，Schrödinger 表示における密度演算子は

$$\hat{\rho}(t) \equiv \sum_n |\psi_n(t)\rangle P_n \langle\psi_n(t)| \tag{7.13}$$

で定義される．ここで統計因子 P_n は時間によらない．(7.13)を微分して，(5.2)を用いると

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\hat{\rho}(t)}{\mathrm{d}t} &= \sum_n \left\{\frac{\mathrm{d}|\psi_n(t)\rangle}{\mathrm{d}t} P_n\langle\psi_n(t)| + |\psi_n(t)\rangle P_n \frac{\mathrm{d}\langle\psi_n(t)|}{\mathrm{d}t}\right\} \\ &= \frac{1}{i\hbar}\sum_n \{\hat{H}|\psi_n(t)\rangle P_n\langle\psi_n(t)| - |\psi_n(t)\rangle P_n\langle\psi_n(t)|\hat{H}\} \\ &= \frac{1}{i\hbar}\{\hat{H}\hat{\rho}(t) - \hat{\rho}(t)\hat{H}\}\end{aligned}$$

をえる．したがって

$$-i\hbar\,\mathrm{d}\hat{\rho}(t)/\mathrm{d}t = [\hat{\rho}(t), \hat{H}]. \tag{7.14}$$

ここで，$\hat{\rho}(t)$ と $\hat{H}$ はいずれも Schrödinger 演算子であることに注意されたい．密度演算子は，Schrödinger 表示の演算子で運動法則によって時間的に変動するただ1個の演算子である．(7.14)は Heisenberg の方程式(5.30)と似ているが，左辺の符号が反対であることに注意しよう．この方程式は古典統計力学の Liouville の方程式に対応するものである．なお，Heisenberg 表示の密度演算子は上とは反対に，時間的に変化しない．

§8　正準量子化の手続き

ここで，古典力学およびこれまでに展開してきた量子力学の復習を兼ねて，考えている体系が古典的対応物をもつときの量子化の標準的手続きについて説明しておこう．簡単のため，ここでは自由度1の場合について述べるが，多自由度系への一般化も容易である．しかし，力学量の間に束縛条件が要求されているときには，量子化の手続きは面倒なものになるので，その種の高級な問題にはここでは触れないことにする．

量子力学の理論は，その基礎を古典力学における Hamilton 形式の理論においている．その **Hamilton 形式**の理論は，**Lagrange 形式**の理論から出発する．ここでは簡単のため，ポテンシャル・エネルギーが $V(q)$ で与えられる 1 次元の古典的体系を考える．いま，質量 m の粒子の位置 q が時間 t の関数 $q=q(t)$ で記述されているとき，その粒子の運動エネルギーとポテンシャル・エネルギーの差

$$L = (1/2)m\dot{q}^2(t) - V(q(t)) \tag{8.1}$$

をこの系の**ラグランジアン**という．これを時刻 t_1 から t_2 にわたって積分した

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L(q(t), \dot{q}(t))\,\mathrm{d}t \tag{8.2}$$

を**作用積分**という．ここで $\dot{q}(t) \equiv \mathrm{d}q(t)/\mathrm{d}t$ は，$q(t)$ の関数形が与えられていれば，それを時間 t で微分することによってえられる．すなわち，(8.2)の積分値 I は，$q=q(t)$ の関数形が与えられれば決定する．さて問題は，自然界に実現している運動 $q=q(t)$ はどのような条件により規定されるかということである．そこで，さきに与えた $q(t)$ とは少し違う関数 $q'(t)=q(t)+\delta q(t)$ をとって，(8.2)の積分をもういちど計算する．ここに追加した微小関数 $\delta q(t)$ を変分関数という．ただし，ここでは(8.2)の積分の両端で

$$\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0 \tag{8.3}$$

の条件をみたしているものとする．関数 $q'(t)$ と $q(t)$ の差 $\delta q(t)$ は，それぞれの運動の速度差 $\mathrm{d}q'(t)/\mathrm{d}t - \mathrm{d}q(t)/\mathrm{d}t = \mathrm{d}\delta q(t)/\mathrm{d}t$ をもたらす．さて，$q'(t)$ と $\mathrm{d}q'(t)/\mathrm{d}t$ を(8.1)のラグランジアンに代入して，2 次以上の微小量を無視すると

$$\begin{aligned} L(q'(t), \dot{q}'(t)) &= L\left(q(t)+\delta q(t),\ \dot{q}(t)+\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta q(t)\right) \\ &= L(q(t), \dot{q}(t)) + \frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial q}\delta q(t) + \frac{\partial L(q,\dot{q})}{\partial \dot{q}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta q(t). \end{aligned} \tag{8.4}$$

自然界に実現する運動は，$q'(t)$ を用いたときの作用積分 I' の値と，$q(t)$ を用いたときの積分値 I の差 $\delta I = I' - I$ が 0 であるような運動であるというのが，解析力学における **Hamilton の原理**である．そこで(8.4)を用いると，この原理は

$$\delta I = \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \delta q(t) + \frac{\partial L}{\partial q} \delta q(t) \right] \mathrm{d}t = 0 \tag{8.5}$$

と表わされる．ここで右辺の第1項を部分積分して，(8.3)の条件を利用すると

$$\delta I = -\int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} \right] \delta q(t) \mathrm{d}t = 0$$

となる．これが任意関数 $\delta q(t)$ に対して成立するためには

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \tag{8.6}$$

でなければならない．これが **Lagrange の方程式**で，自然界に実現している運動 $q=q(t)$ は，この方程式の解として決まる．(8.6)に(8.1)を代入すれば，Newton の運動方程式

$$m \frac{\mathrm{d}^2 q(t)}{\mathrm{d}t^2} = -\frac{\partial V(q)}{\partial q}$$

がえられる．

このように，粒子の軌道関数 $q=q(t)$ を未知関数として，作用積分の値を極値あるいは定留値にするように関数 $q=q(t)$ を選ぶというのが，Lagrange 形式の理論である．この形式の理論では，軌道関数 $q=q(t)$ を基本量として，粒子の速度は $q(t)$ を時間 t で微分することにより与えられるとする．ところが，第1章でも強調したように，量子力学では，粒子の波動性のために，速度という量は一義的な意味をもたない．それよりも，Einstein-de Broglie の関係 $p=\hbar/\lambda$ により，粒子に伴う波の波長を測定することにより一義的にその値を決定できる運動量 p のほうをより基本的な量と考えるべきである．そこで粒子の位置 q と運動量 p を独立な基本量とする理論形式があれば，その理論にもとづいて量子力学の理論を構成するのが自然であろう．この要求にマッチしているのが，古典力学における Hamilton 形式の理論である．この理論では，まず(8.1)の Lagrange 関数 $L=L(q,\dot{q})$ を用いて，**正準運動量** p を

$$p(t) = \frac{\partial L(q(t), \dot{q}(t))}{\partial \dot{q}(t)} \tag{8.7}$$

で定義する．L が(8.1)のとき，(8.7)は $p=m\dot{q}$ を与えるが，ポテンシャル関数 V が $\dot{q}$ を含むときには，正準運動量 p と速度 $\dot{q}$ は全く別の物理量となる．

さて，(8.7)を逆に解いて，$\dot{q}=\dot{q}(q,p)$ と書き，これを(8.6)に代入すると

$$\frac{\mathrm{d}p(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial L(\dot{q}(q,p),q)}{\partial q} \tag{8.8}$$

となる．ここでハミルトニアン H を正準変数 $q(t)$ と $p(t)$ の関数として

$$H = \dot{q}(q,p)p - L(\dot{q}(q,p),q) \tag{8.9}$$

で定義する．H を独立量 q と p の関数とみて，(8.9)の全微分を求めると

$$\mathrm{d}H(q,p) = \frac{\partial H}{\partial p}\mathrm{d}p + \frac{\partial H}{\partial q}\mathrm{d}q \tag{8.10}$$

である．一方，(8.9)の右辺の正準変数 q,p についての全微分をとると

$$\begin{aligned} \mathrm{d}H(q,p) &= \frac{\partial(\dot{q}p)}{\partial q}\mathrm{d}q + \frac{\partial(\dot{q}p)}{\partial p}\mathrm{d}p - \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}}{\partial q}\mathrm{d}q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}}\frac{\partial \dot{q}}{\partial p}\mathrm{d}p + \frac{\partial L}{\partial q}\mathrm{d}q\right] \\ &= \left[\frac{\partial \dot{q}}{\partial q}p\,\mathrm{d}q + \frac{\partial \dot{q}}{\partial p}p\,\mathrm{d}p + \dot{q}\,\mathrm{d}p\right] - \left[p\frac{\partial \dot{q}}{\partial q}\mathrm{d}q + p\frac{\partial \dot{q}}{\partial p}\mathrm{d}p + \dot{p}\,\mathrm{d}q\right] \\ &= \dot{q}\,\mathrm{d}p - \dot{p}\,\mathrm{d}q \end{aligned} \tag{8.11}$$

となる．ここで 2 番目の等号では，p と q が独立変数であるため $\partial p/\partial q=0$ であり，また(8.7)の定義と(8.8)を用いた．(8.10)と(8.11)の右辺を比較し，$\mathrm{d}p$ と $\mathrm{d}q$ が独立量であることに注意すると，

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H(q,p)}{\partial p}, \qquad \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H(q,p)}{\partial q} \tag{8.12}$$

がえられる．この $q(t)$ と $p(t)$ に関する連立方程式を **Hamilton の正準方程式**という．これは(8.6)の Lagrange 方程式と等価な方程式であるが，(8.12)では，速度 $\dot{q}$ が用いられていないことに注意すべきである．(8.12)を

$$q(t+\Delta t) = q(t) + \left(\frac{\partial H}{\partial p}\right)_t \Delta t, \qquad p(t+\Delta t) = p(t) - \left(\frac{\partial H}{\partial q}\right)_t \Delta t \tag{8.13}$$

と書き直してみれば，その事情がはっきりする．すなわち，(8.13)は，時刻 t における $q(t)$ と $p(t)$ を与えたとき，それから少し後の時刻 $t+\Delta t$ における粒子の位置 $q(t+\Delta t)$ と運動量 $p(t+\Delta t)$ が決まるということを意味する．このように，$q(t)$ の時間微分係数 $\mathrm{d}q(t)/\mathrm{d}t$ で与えられる速度を利用しないで，正準変数 q と p で運動法則を記述するのが Hamilton 形式の理論である．

最後に，正準変数の関数で与えられる任意の力学量 $F=F(q(t),p(t))$ のみた

す運動法則を求めておこう．それは(8.12)の正準方程式を用いることにより

$$\frac{\mathrm{d}F(q,p)}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial F}{\partial q}\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}+\frac{\partial F}{\partial p}\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p}-\frac{\partial F}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q}\equiv[F,H]_c \tag{8.14}$$

で与えられる．ここで$[\ ,\ ]_c$は

$$[A,B]_c\equiv\frac{\partial A}{\partial q}\frac{\partial B}{\partial p}-\frac{\partial A}{\partial p}\frac{\partial B}{\partial q} \tag{8.15}$$

で定義されるもので，これを**Poisson の括弧**という．ここで $A=q(t)$，$B=p(t)$ とおくと

$$[q(t),p(t)]_c=1 \tag{8.16}$$

となる．ここまでは，すべて古典力学の話である*.

ここで，われわれは量子力学に移行する．そのとき，(8.15)の Poisson の括弧のかわりに

$$[\hat{A},\hat{B}]\equiv\hat{A}\cdot\hat{B}-\hat{B}\cdot\hat{A} \tag{8.17}$$

と定義し直して，(8.16)を正準演算子 $\hat{q}(t)$ と $\hat{p}(t)$ に対する演算子方程式

$$[\hat{q}(t),\hat{p}(t)]=i\hbar \tag{8.18}$$

におきかえる．これが**正準量子化の手続き**である．これに伴って，(8.9)のハミルトニアンも，演算子

$$\hat{H}=H(\hat{q}(t),\hat{p}(t)) \tag{8.19}$$

におきかえられる．なおこのとき，$\hat{q}(t)$ と $\hat{p}(t)$ はエルミート演算子であるが，その積はエルミートになるとはかぎらない．古典的ハミルトニアンが，例えば $q(t)\cdot p(t)$ のような項を含むときには，$q\cdot p\rightarrow(\hat{q}\cdot\hat{p}+\hat{p}\cdot\hat{q})/2$ のように対称化して，$\hat{H}$ がエルミート演算子になるようにする．しかし，その方法は一義的ではないので，そのどれを選ぶかは実験との比較によるほかはない．正準交換関係(8.18)を設定したことに伴って，(8.14)の方程式は演算子方程式として

$$\frac{\mathrm{d}\hat{F}(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{i\hbar}[\hat{F}(t),\hat{H}] \tag{8.20}$$

におきかえられる．これが(5.30)の Heisenberg の運動方程式である．ここで $\hat{F}(t)$ として，$\hat{q}(t)$ と $\hat{p}(t)$ をとると，(8.20)は，それぞれ

---

*　(8.15)の Poisson 括弧も，(3.3)と同形の恒等式をみたす．

$$\frac{\mathrm{d}\hat{q}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}(t), \hat{H}], \qquad \frac{\mathrm{d}\hat{p}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}(t), \hat{H}] \tag{8.21}$$

となる．(8.18)の正準交換関係からえられる(3.7)と(3.8)を利用して，(8.21)の右辺の交換関係を計算すると

$$[\hat{q}(t), \hat{H}] = i\hbar\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}(t)}, \qquad [\hat{p}(t), \hat{H}] = -i\hbar\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}(t)} \tag{8.22}$$

である．このとき，(8.21)は

$$\frac{\mathrm{d}\hat{q}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}(t)}, \qquad \frac{\mathrm{d}\hat{p}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{q}(t)} \tag{8.23}$$

となり，この形は古典力学の正準方程式(8.12)と正確に一致する．これが，(8.18)の交換関係を要求する理由となっている．ここで仮に，交換関係として(8.18)以外のものを仮定したのでは，(8.23)が成立せず，したがって上のような一致もえられない．ただし，第6章§6に述べるように，正準交換関係ではなく，反交換関係というものを仮定する余地は残されているが，この場合には系は古典的対応物をもたない．

Heisenberg の方程式(8.20)の解は，時刻 $t=0$ における初期値 $\hat{F}$ を用いることによって

$$\hat{F}(t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{8.24}$$

と表わされる．ここでとくに $\hat{F}=\hat{H}$ とすれば $\hat{H}(t)=\hat{H}$ である．そこで $\hat{H}$ の固有状態 $|m\rangle$ をとり，$\hat{H}|m\rangle=E_m|m\rangle$ とすれば，(8.24)の行列要素は

$$\langle m|\hat{F}(t)|n\rangle = \mathrm{e}^{-i(E_n-E_m)t}\langle m|\hat{F}|n\rangle \tag{8.25}$$

となる．すなわち，エネルギー表示では，$\hat{F}(t)$ の行列要素の時間的変動は力学系の構造に無関係に(8.25)のような振動解で表わされる．これが **Heisenberg の行列力学**である．

これまでの理論は，演算子が時間的に変動すると考える Heisenberg 表示の理論であった．ここで，その時間依存性を状態ベクトルに押しつける Schrödinger 表示に移行する．Heisenberg 表示における任意の状態ベクトルを $|\psi\rangle$ とすると，$\hat{F}(t)$ の期待値は

$$\langle\psi|\hat{F}(t)|\psi\rangle = \langle\psi|\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{F}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle \tag{8.26}$$

で与えられる．そこで

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle \tag{8.27}$$

とおくと，(8.26)は

$$\langle\psi|\hat{F}(t)|\psi\rangle = \langle\psi(t)|\hat{F}|\psi(t)\rangle$$

と表わされ，また(8.27)を t で微分することにより

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{8.28}$$

をえる．これがSchrödingerの方程式である．また，(8.24)の逆変換を利用することにより，Schrödinger表示における正準交換関係として

$$[\hat{q},\hat{p}] = \mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}[\hat{q}(t),\hat{p}(t)]\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar} = i\hbar \tag{8.29}$$

がえられる．すなわち，(8.27)のユニタリー変換は正準変換である．

(8.29)のSchrödinger表示での正準交換関係は，位置表示を用いて

$$q = q, \qquad p = (\hbar/i)\partial/\partial q \tag{8.30}$$

とすれば自動的にみたされる．また，(8.28)の位置表示をとると

$$i\hbar\frac{\partial\langle q|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q'\langle q|\hat{H}|q'\rangle\langle q'|\psi(t)\rangle$$

となり，ここで $\langle q|\psi(t)\rangle=\psi(q,t)$ とおき，

$$\langle q|\hat{H}|q'\rangle = H\left(q,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\delta(q-q')$$

を代入すると，量子力学の出発点となったSchrödingerの方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(q,t)}{\partial t} = H\left(q,\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)\psi(q,t) \tag{8.31}$$

がえられる．第1章で天下りに仮定したSchrödingerの方程式は，上に述べた正準量子化の手続きの最終結果としてえられる．

§9　調和振動子

ここで，前節に述べた量子化の手続きの例題として，1次元の調和振動子をとりあげよう．調和振動子の問題は，単に厳密に解ける数少ない例題であるというよりも，より原理的な意味をもっている．なぜなら，第8章で示されるように，電磁場をはじめとして，場で記述される体系はすべて，無限個の調和振動子からなる体系とみなすことができるからである．

(1) 正準量子化

質量 m，固有角振動数 ω_0 の1次元の調和振動子のラグランジアン L は

$$L = (1/2)m\dot{q}^2(t) - (1/2)m\omega_0{}^2q^2(t) \tag{9.1}$$

で与えられる．これを(8.6)のLagrangeの方程式に代入すると，運動方程式として

$$m\,\mathrm{d}^2q(t)/\mathrm{d}t^2 = -m\omega_0{}^2q(t) \tag{9.2}$$

をえる．ここで正準運動量を(8.7)で定義すると，$p(t)=m\dot{q}(t)$ となる．これを用いると，(8.9)のハミルトニアンは

$$H = (1/2m)p^2(t) + (1/2)m\omega_0{}^2q^2(t) \tag{9.3}$$

で与えられる．(9.3)を(8.12)の正準方程式に代入すれば

$$\dot{q}(t) = p(t)/m, \quad \dot{p}(t) = -m\omega_0{}^2q(t) \tag{9.4}$$

がえられる．ここまでが古典力学の話である．

ここで，正準変数 $q(t)$ と $p(t)$ をそれぞれ演算子 $\hat{q}(t)$ と $\hat{p}(t)$ におきかえて，正準交換関係

$$[\hat{q}(t), \hat{p}(t)] = i\hbar \tag{9.5}$$

を要求することにより，量子力学に移行する．このとき量子化されたハミルトニアンは

$$\hat{H} = (1/2m)\hat{p}^2(t) + (1/2)m\omega_0{}^2\hat{q}^2(t) \tag{9.6}$$

で与えられる．なおここで，$\hat{Q}=\sqrt{m}\hat{q}$，$\hat{P}=\hat{p}/\sqrt{m}$ とおくと，(9.5)と(9.6)はそれぞれ

$$[\hat{Q}(t), \hat{P}(t)] = i\hbar, \quad \hat{H} = (1/2)\hat{P}^2(t) + (1/2)\omega_0{}^2\hat{Q}^2(t) \tag{9.7}$$

となり，質量 m を消去することができる．この表式は後に電磁場の量子論で利用される．話をもどして，(9.5)と(9.6)を用いて，Heisenbergの方程式を求めると，

$$\frac{\mathrm{d}\hat{q}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{q}(t), \hat{H}] = \hat{p}(t)/m, \quad \frac{\mathrm{d}\hat{p}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{p}(t), \hat{H}] = -m\omega_0{}^2\hat{q}(t) \tag{9.8}$$

となる．これは(9.4)の古典力学の正準方程式と同形である．

ここで，以下で重要な役割を果す非エルミート演算子 $\hat{a}(t)$ と $\hat{a}^\dagger(t)$ を次のように定義する．

$$\hat{a}(t) = \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}[\hat{p}(t) - im\omega_0\hat{q}(t)],$$
$$\hat{a}^\dagger(t) = \frac{-i}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}[\hat{p}(t) + im\omega_0\hat{q}(t)]. \tag{9.9}$$

ここで(9.5)の正準交換関係を用いると，

$$[\hat{a}(t), \hat{a}^\dagger(t)] = 1 \tag{9.10}$$

であり，また(9.6)の $\hat{H}$ は

$$\hat{H} = \hbar\omega_0[\hat{a}^\dagger(t)\hat{a}(t) + 1/2] \tag{9.11}$$

と表わされる．(9.10)と(9.11)より，$\hat{a}(t)$ と $\hat{a}^\dagger(t)$ の運動方程式は次のようになる．

$$\frac{\mathrm{d}\hat{a}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{a}(t), \hat{H}] = -i\omega_0\hat{a}(t),$$
$$\frac{\mathrm{d}\hat{a}^\dagger(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}[\hat{a}^\dagger(t), \hat{H}] = +i\omega_0\hat{a}^\dagger(t). \tag{9.12}$$

そこで，初期条件として $\hat{a}(0)=\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger(0)=\hat{a}^\dagger$ をとると，上の方程式の解は

$$\hat{a}(t) = \hat{a}\,\mathrm{e}^{-i\omega_0 t}, \qquad \hat{a}^\dagger(t) = \hat{a}^\dagger \mathrm{e}^{i\omega_0 t} \tag{9.13}$$

で与えられる．(9.13)を(9.10)および(9.11)に代入すると

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1, \qquad \hat{H} = \hbar\omega_0[\hat{a}^\dagger\hat{a} + 1/2] \tag{9.14}$$

となる．これらは，Schrödinger 表示での交換関係とそのハミルトニアンである．

(9.9)を逆に解いて，(9.13)の解を代入すると

$$\hat{q}(t) = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,[\hat{a}\,\mathrm{e}^{-i\omega_0 t} + \hat{a}^\dagger \mathrm{e}^{i\omega_0 t}],$$
$$\hat{p}(t) = -i\sqrt{m\hbar\omega_0/2}\,[\hat{a}\,\mathrm{e}^{-i\omega_0 t} - \hat{a}^\dagger \mathrm{e}^{i\omega_0 t}] \tag{9.15}$$

と表わされる．(9.15)で $t=0$ とし，$\hat{q}=\hat{q}(0)$，$\hat{p}=\hat{p}(0)$ とおけば

$$\hat{q} = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}(\hat{a} + \hat{a}^\dagger), \qquad \hat{p} = -i\sqrt{m\hbar\omega_0/2}(\hat{a} - \hat{a}^\dagger) \tag{9.16}$$

である．これらを用いて，(9.15)から $\hat{a}$ と $\hat{a}^\dagger$ を消去すると

$$\hat{q}(t) = \hat{q}\cos\omega_0 t + (\hat{p}/m\omega_0)\sin\omega_0 t,$$
$$\hat{p}(t) = \hat{p}\cos\omega_0 t - m\omega_0\hat{q}\sin\omega_0 t \tag{9.17}$$

となり，これは古典力学における正準方程式の初期値問題の解と全く同形である．なお，(9.16)と(9.14)の第1式から，Schrödinger 表示での正準交換関係

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \tag{9.18}$$

がえられる．そこで，(9.17)と(9.18)を用いて，異なる時刻での Heisenberg 演算子の交換関係を求めると，例えば

$$[\hat{q}(t), \hat{q}(t')] = (\hbar/im\omega_0)\sin\omega_0(t-t') \tag{9.19}$$

がえられる．すなわち，同時刻でない Heisenberg 演算子は一般に交換不能である．

(2) 固有値問題

Heisenberg 表示での状態 $|\psi\rangle$ から，Schrödinger 表示での状態 $|\psi(t)\rangle$ への変換は

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle \tag{9.20}$$

で与えられ，これを t で微分すると，Schrödinger の方程式

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \left(\frac{1}{2m}\hat{p}^2 + \frac{1}{2}m\omega_0{}^2\hat{q}^2\right)|\psi(t)\rangle \tag{9.21}$$

をえる．ここで位置表示をとると

$$i\hbar\frac{\partial\psi(q,t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q^2} + \frac{1}{2}m\omega_0{}^2q^2\right]\psi(q,t) \tag{9.22}$$

となる．そこで定常状態 $\psi(q,t) = \mathrm{e}^{-iE_nt/\hbar}\phi_n(q)$ をとり，これを(9.22)に代入すると，Schrödinger の固有値方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q^2} + \frac{1}{2}m\omega_0{}^2q^2\right)\phi_n(q) = E_n\phi_n(q) \tag{9.23}$$

がえられる．普通は，この2階常微分方程式を解くのに級数展開法を用いるのであるが，ここではそれよりも見通しのよい代数的方法を用いて固有値問題を解くことにする．

いま，エルミート演算子 $\hat{N}$ を $\hat{N} = \hat{a}^\dagger\hat{a}$ で定義すると，(9.14)の交換関係により

$$\begin{aligned}[\hat{N}, \hat{a}] &= [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}] = [\hat{a}^\dagger, \hat{a}]\hat{a} = -\hat{a},\\ [\hat{N}, \hat{a}^\dagger] &= [\hat{a}^\dagger\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = +\hat{a}^\dagger\end{aligned} \tag{9.24}$$

である．ここで $\hat{N}$ の固有値方程式を

$$\hat{N}|n\rangle = \lambda_n|n\rangle \tag{9.25}$$

とし，$|n\rangle$ は規格化されているものとする．このとき，(9.24)より

$$\hat{N}\hat{a}|n\rangle = \hat{a}(\hat{N}-1)|n\rangle = (\lambda_n-1)\hat{a}|n\rangle,$$
$$\hat{N}\hat{a}^\dagger|n\rangle = \hat{a}^\dagger(\hat{N}+1)|n\rangle = (\lambda_n+1)\hat{a}^\dagger|n\rangle. \tag{9.26}$$

すなわち，状態 $\hat{a}|n\rangle$ と，状態 $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ もまた，$\hat{N}$ の固有状態であり，それぞれの状態の固有値は (λ_n-1) および (λ_n+1) である．つまり，演算子 $\hat{a}$ は固有状態 $|n\rangle$ から，その固有値が1だけ小さい固有状態をつくる演算子であり，また $\hat{a}^\dagger$ は固有値が1だけ大きい固有状態をつくる演算子である．そこで $\hat{a}^\dagger$ と $\hat{a}$ を**昇降演算子**という．さて，

$$\langle n|\hat{N}|n\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}|a\phi_n(q)|^2\mathrm{d}q \geqq 0$$

であり，一方，$\langle n|\hat{N}|n\rangle=\lambda_n\langle n|n\rangle=\lambda_n$ であるから，$\hat{N}$ の固有値 λ_n は正または0である．すなわち，$\lambda_n\geqq 0$ である．そこで，λ_n のうちの最小のものを λ_0 と書き，この固有値に属する固有状態を $|0\rangle$ と表わそう．(9.26)の第1式によると，固有状態 $|n\rangle$ に $\hat{a}$ を作用させると，固有値が1だけ小さい (λ_n-1) の固有状態がえられる．ところが，固有値 λ_0 は最小固有値であるから，$\hat{a}$ を状態 $|0\rangle$ に作用させたときにえられる固有値 (λ_0-1) に属する固有状態は存在しない．すなわち

$$\hat{a}|0\rangle = 0 \tag{9.27}$$

である．このとき $\lambda_0=\langle 0|\hat{N}|0\rangle=\langle 0|\hat{a}^\dagger\hat{a}|0\rangle=0$ である．つまり，最小固有値 λ_0 は0である．すると，(9.26)の第2式から，固有状態 $\hat{a}^\dagger|0\rangle$ の固有値は1，$\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger|0\rangle$ の固有値は2，一般に状態 $(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle$ の固有値は n で与えられることになる．したがって，演算子 $\hat{N}$ の固有値は $n=0,1,2,\cdots$ の0および正の整数で与えられる．すなわち，

$$\lambda_n = n, \qquad n = 0,1,2,\cdots \tag{9.28}$$

である．このとき，(9.14)の第2式より

$$\hat{H}|n\rangle = \hbar\omega_0(n+1/2)|n\rangle, \qquad n = 0,1,2,\cdots \tag{9.29}$$

となる．したがって，調和振動子のエネルギー固有値は

$$E_n = \hbar\omega_0(n+1/2), \qquad n = 0,1,2,\cdots \tag{9.30}$$

で与えられる．$n=0$ のときの最低のエネルギー固有値 $E_0=\hbar\omega_0/2$ を**零点エネルギー**という．これは，Heisenberg の不確定性関係により，粒子の運動エネルギー $\hat{p}^2/2m$ と位置エネルギー $(1/2)m\omega_0{}^2\hat{q}^2$ を同時に0にすることができな

いことに原因するエネルギーである．

さて(9.26)より，固有状態 $\hat{a}^\dagger|n\rangle$ および $\hat{a}|n\rangle$ はそれぞれ固有値 $(n+1)$ と $(n-1)$ に属する固有ベクトルであるから

$$|n+1\rangle = c_n\hat{a}^\dagger|n\rangle, \qquad |n-1\rangle = d_n\hat{a}|n\rangle$$

と書くことができる．ここで c_n と d_n は未定の複素係数である．状態ベクトル $|n\pm1\rangle$ が $|n\rangle$ と同様に規格化されているとすると，

$$\begin{aligned}1 = \langle n+1|n+1\rangle &= |c_n|^2\langle n|\hat{a}\hat{a}^\dagger|n\rangle\\ &= |c_n|^2\langle n|\{\hat{a}^\dagger\hat{a}+1\}|n\rangle = |c_n|^2(n+1)\end{aligned}$$

より，$c_n=\mathrm{e}^{i\delta}/\sqrt{n+1}$ をえる．不定の位相 δ は 0 に選んでよい．同様にして，$d_n=1/\sqrt{n}$ となる．すなわち

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \qquad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \tag{9.31}$$

である．(9.31)の第1式を繰りかえして用いると，規格化された固有ベクトル $|n\rangle$ は基底状態 $|0\rangle$ を用いて

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^\dagger)^n|0\rangle \tag{9.32}$$

と表わされる．

次に最小の固有値に属する基底状態 $|0\rangle$ を求めよう．この状態は(9.27)をみたす状態である．そこで(9.27)の位置表示をとると，(9.16)より

$$\hat{a}|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}|q\rangle\langle q|\left\{\frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}(\hat{p}-im\omega_0\hat{q})\right\}|q'\rangle\langle q'|0\rangle\mathrm{d}q\mathrm{d}q'$$

となる．これに

$$\langle q|(\hat{p}-im\omega_0\hat{q})|q'\rangle = \left[\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}-im\omega_0 q\right]\delta(q-q')$$

を代入し，$\langle q|0\rangle=\phi_0(q)$ と書くと，

$$\hat{a}|0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}\int_{-\infty}^{\infty}|q\rangle\left\{\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}-im\omega_0 q\right\}\phi_0(q)\mathrm{d}q = 0.$$

したがって，基底状態の固有関数 $\phi_0(q)$ は微分方程式

$$\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}-im\omega_0 q\right)\phi_0(q) = 0 \tag{9.33}$$

の解で与えられる．代入してみればすぐに分かるように，(9.33)の解は

$$\phi_0(q) = N_0 \mathrm{e}^{-m\omega_0 q^2/2\hbar} \tag{9.34}$$

である．ここで $N_0=(m\omega_0/\hbar\pi)^{1/4}$ は規格化定数である．励起状態の固有関数 $\langle q|n\rangle=\phi_n(q)$ は，(9.32)より

$$\phi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{-i}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}\right)^n \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}+im\omega_0 q\right)^n \phi_0(q) \tag{9.35}$$

で与えられる．ここで $\xi=\beta q$，$\beta=\sqrt{m\omega_0/\hbar}$ とおくと，(9.35)は

$$\phi_n(q) = N_n\left[\xi-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right]^n \mathrm{e}^{-\xi^2/2}, \qquad N_n = \sqrt{\frac{\beta}{\pi^{1/2}n!2^n}} \tag{9.36}$$

と表わされる．さて，**Hermite の多項式**は

$$H_n(\xi) = (-1)^n \mathrm{e}^{\xi^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2} \tag{9.37}$$

で定義される関数である．この Hermite の多項式を用いると，(9.36)は

$$\phi_n(q) = N_n H_n(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \tag{9.38}$$

と表わされることが，数学的帰納法により証明される(問18)．

次に，(9.15)の Heisenberg 演算子 $\hat{q}(t)$ のエネルギー表示での行列要素を調べておこう．このとき

$$\langle m|\hat{q}(t)|n\rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,[\langle m|\hat{a}|n\rangle\mathrm{e}^{-i\omega_0 t}+\langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle\mathrm{e}^{i\omega_0 t}]$$

において，(9.31)より

$$\langle m|\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\langle m|n-1\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{m,n-1},$$
$$\langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle m|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}$$

であるから，

$$\langle m|\hat{q}(t)|n\rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,[\sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}\mathrm{e}^{-i\omega_0 t}+\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}\mathrm{e}^{i\omega_0 t}] \tag{9.39}$$

である．すなわち，調和振動子の位置演算子の行列要素は，$m=n\mp 1$ のときだけ0でない値をもっている．これを**調和振動子の選択規則**という．なお，(9.39)から分かるように，調和振動子の位置演算子のエネルギー表示の行列要素は，量子数 n に関係なく一定の角振動数 ω_0 で振動する．この点が調和振動子の特徴である．

ここで，基底状態における不確定性関係を求めよう．このとき，

$$\begin{aligned}\bar{q} &= \langle 0|\hat{q}|0\rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega_0}\langle 0|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|0\rangle = 0,\\ \bar{p} &= \langle 0|\hat{p}|0\rangle = (1/i)\sqrt{m\hbar\omega_0/2}\langle 0|(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)|0\rangle = 0\end{aligned} \tag{9.40}$$

である．ここで $\hat{a}|0\rangle=0$ のとき，$\{\hat{a}|0\rangle\}^\dagger=\langle 0|\hat{a}^\dagger=0$ であることを利用している．同様にして

$$\begin{aligned}\overline{q^2} &= \langle 0|\hat{q}^2|0\rangle = (\hbar/2m\omega_0)\langle 0|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|0\rangle = \hbar/2m\omega_0,\\ \overline{p^2} &= \langle 0|\hat{p}^2|0\rangle = -(m\hbar\omega_0/2)\langle 0|(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)|0\rangle = m\hbar\omega_0/2\end{aligned} \tag{9.41}$$

である．したがって，

$$\overline{(\Delta q)^2} = \overline{(q-\bar{q})^2} = \overline{q^2}, \qquad \overline{(\Delta p)^2} = \overline{(p-\bar{p})^2} = \overline{p^2} \tag{9.42}$$

より，

$$\sqrt{\overline{(\Delta q)^2}\cdot\overline{(\Delta p)^2}} = \hbar/2 \tag{9.43}$$

である．すなわち，基底状態での不確定性はその最小値で与えられる．

最後に，多数の独立な振動子からなる系が熱平衡状態にあるときの密度行列を求めよう．このとき，統計的な確率分布関数 P_n としては，Boltzmann 分布 $P_n=\exp(-\beta E_n)/\sum_n \exp(-\beta E_n)$ をとる．ここで $\beta=1/k_{\mathrm{B}}T$ で，k_{B} は Boltzmann 定数，T は熱力学的絶対温度である．いまの場合，(9.30)により $E_n=\hbar\omega_0(n+1/2)$ であるから

$$P_n = \mathrm{e}^{-\beta n\hbar\omega_0}(1-\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega_0})$$

である．したがって，密度演算子 $\hat{\rho}$ は

$$\hat{\rho} = (1-\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega_0})\cdot\sum_n \mathrm{e}^{-\beta n\hbar\omega_0}|n\rangle\langle n| \tag{9.44}$$

で与えられる．このとき，演算子 $\hat{N}$ の統計的平均値 $\bar{n}\equiv\langle\!\langle N\rangle\!\rangle$ は

$$\bar{n} = \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{a}^\dagger\hat{a}) = (1-\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega_0})\cdot\sum_n n\,\mathrm{e}^{-\beta n\hbar\omega_0} = 1/(\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_0}-1) \tag{9.45}$$

である．この平均値 $\bar{n}$ を用いて，(9.44)の $\hat{\rho}$ を表わすと

$$\hat{\rho} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\bar{n}^n}{(1+\bar{n})^{n+1}}|n\rangle\langle n| \tag{9.46}$$

で，その密度行列は

$$\rho_{m,n} = \langle m|\hat{\rho}|n\rangle = \frac{\bar{n}^n}{(1+\bar{n})^{n+1}}\delta_{n,m} \tag{9.47}$$

で与えられる．このとき $\rho_{m,n}$ の非対角要素は 0 であることに注意されたい．

また，(9.47)を用いて位置演算子 $\hat{q}(t)$ の統計的平均値 $\langle\!\langle q(t)\rangle\!\rangle$ を求めると，(9.39)より

$$
\begin{aligned}
\langle\!\langle q(t)\rangle\!\rangle &= \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{q}(t)) = \sum_{n,m}\langle n|\hat{\rho}|m\rangle\langle m|\hat{q}(t)|n\rangle \\
&= \sqrt{\hbar/2m\omega_0}\sum_n[\bar{n}^n/(1+\bar{n})^{n+1}]\cdot[\sqrt{n}\,\mathrm{e}^{-i\omega_0 t}\delta_{n,n-1}+\sqrt{n+1}\,\mathrm{e}^{i\omega_0 t}\delta_{n,n+1}] \\
&= 0 \qquad (9.48)
\end{aligned}
$$

である．

問 17　調和振動子の零点エネルギー $E_0=\hbar\omega_0/2$ を生じる原因が，(9.43)の不確定性関係 $\sqrt{\overline{(\Delta q)^2}\cdot\overline{(\Delta p)^2}}=\sqrt{\overline{q^2}\cdot\overline{p^2}}=\hbar/2$ にあることを定性的に示せ．

問 18　(9.36)の固有関数 $\phi_n(q)$ が(9.38)の形に表わせることを数学的帰納法により証明せよ．

問 19　調和振動子の励起状態 $|n\rangle$ における不確定性が $\sqrt{\overline{(\Delta q)^2}\cdot\overline{(\Delta p)^2}}=\hbar(n+1/2)$ で与えられることを示せ．

問 20　(9.47)の密度行列を，条件 $\bar{n}=\sum_n nP_n$, $\sum_n P_n=1$ のもとで，系のエントロピー $S\equiv -k_{\mathrm{B}}\sum_n P_n\log P_n$ を最大にすることから求めよ．すなわち，(9.47)の分布は系の分布が完全に無秩序であることを示すものである．

(3)　コヒーレント状態

これまでは，オブザーバブルであるエルミート演算子の固有値問題だけを扱ってきたが，ここで(9.31)のように量子数 n の値を1個減少させる消滅演算子 $\hat{a}$ の固有状態 $|\alpha\rangle$ を考える．すなわち

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle \qquad (9.49)$$

とする．$\hat{a}$ はエルミート演算子ではないから，(9.49)の固有値 α は実数であるとはかぎらない．(9.49)で定義される固有状態 $|\alpha\rangle$ を**コヒーレント状態**という．このようによぶ理由は，第8章§6で詳しく説明するように，この状態がレーザー光のような可干渉(coherent)な光を表現するのに適しているからである．

さて，(9.31)の第1式のエルミート共役をとると，$\langle n|\hat{a}=\sqrt{n+1}\langle n+1|$ となるので，これに右から $|\alpha\rangle$ を掛けて(9.49)を用いると

$$\langle n+1|\alpha\rangle = (\alpha/\sqrt{n+1})\langle n|\alpha\rangle \qquad (9.50)$$

である．(9.50)を繰りかえし利用すると

$$\langle n|\alpha\rangle = (\alpha^n/\sqrt{n!})\langle 0|\alpha\rangle. \qquad (9.51)$$

すると

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|\alpha\rangle = \langle 0|\alpha\rangle \sum_{n=0}^{\infty} (\alpha^n/\sqrt{n!})|n\rangle \tag{9.52}$$

となるので，状態ベクトル $|\alpha\rangle$ のノルムの 2 乗は

$$\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle\alpha|0\rangle\langle 0|\alpha\rangle \times \sum_{m,n} \frac{(\alpha^*)^m}{\sqrt{m!}} \cdot \frac{(\alpha)^n}{\sqrt{n!}} \langle m|n\rangle$$

$$= |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \mathrm{e}^{|\alpha|^2}$$

と計算される．ここで規格化条件 $\langle\alpha|\alpha\rangle=1$ を要求すると

$$\langle 0|\alpha\rangle = \exp[-|\alpha|^2/2] \tag{9.53}$$

となる．したがって，コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ は，基底状態 $|0\rangle$ を用いて，

$$|\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle\langle n|\alpha\rangle = \langle 0|\alpha\rangle \sum_n (\alpha^n/\sqrt{n!})|n\rangle$$

$$= \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \cdot \sum_n \frac{(\alpha\hat{a}^\dagger)^n}{n!}|0\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \cdot \mathrm{e}^{\alpha\hat{a}^\dagger}|0\rangle \tag{9.54}$$

と表わされる．3 番目の等号では(9.32)を用いた．ここで $\exp[-\alpha^*\hat{a}]|0\rangle = |0\rangle$ であることに注意すると，(9.54)は，さらに

$$|\alpha\rangle = \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \cdot \mathrm{e}^{\alpha\hat{a}^\dagger} \cdot \mathrm{e}^{-\alpha^*\hat{a}}|0\rangle$$

$$= \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2} \mathrm{e}^{\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a} + |\alpha|^2[\hat{a},\hat{a}^\dagger]/2}|0\rangle$$

$$= \mathrm{e}^{(\alpha\hat{a}^\dagger - \alpha^*\hat{a})}|0\rangle$$

と書きかえられる．ここで 2 番目の等号では，(5.44)の公式を用いて指数関数を一つにまとめた．

コヒーレント状態の性質を調べるために，まずその内積を計算する．(9.52)より

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\alpha|0\rangle\langle 0|\beta\rangle \sum_{m,n} \frac{\alpha^{*m}}{\sqrt{m!}} \cdot \frac{\beta^n}{\sqrt{n!}} \langle m|n\rangle$$

$$= \mathrm{e}^{-|\alpha|^2/2 - |\beta|^2/2} \sum_n (\alpha^*\beta)^n/n! = \mathrm{e}^{\alpha^*\beta - |\alpha|^2/2 - |\beta|^2/2} \tag{9.55}$$

であり，固有値の異なるコヒーレント状態は直交しない．ここで，$\alpha = r\mathrm{e}^{i\theta}$ とおき，α の複素平面上の面積要素を $\mathrm{d}^2\alpha = r\mathrm{d}\theta \cdot \mathrm{d}r$ と書き，複素数 α のとる値の全体にわたって，$|\alpha\rangle\langle\alpha|$ を積分する．すると(9.51)と(9.53)より

$$\int |\alpha\rangle\langle\alpha| \mathrm{d}^2\alpha = \sum_{m,n} \int \mathrm{d}^2\alpha |m\rangle\langle m|\alpha\rangle\langle\alpha|n\rangle\langle n|$$
$$= \sum_{m,n} \frac{1}{\sqrt{m!n!}} |m\rangle\langle n| \int \mathrm{e}^{-|\alpha|^2}\alpha^m \cdot \alpha^{*n} \mathrm{d}^2\alpha$$
$$= \sum_{m,n} \frac{1}{\sqrt{m!n!}} |m\rangle\langle n| \int_0^\infty \mathrm{e}^{-r^2} r^{m+n+1} \mathrm{d}r \cdot \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{i(m-n)\theta} \mathrm{d}\theta$$
$$= \sum_{m,n} \frac{1}{\sqrt{m!n!}} |m\rangle\langle n| \pi \cdot n!\, \delta_{n,m} = \pi \sum_n |n\rangle\langle n| = \pi$$

となる．ここで積分公式

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-ax^2} x^{2n+1} \mathrm{d}x = \frac{n!}{2a^{n+1}}$$

を用いた．したがって，コヒーレント状態の完全性の条件は

$$\frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle\langle\alpha| \mathrm{d}^2\alpha = 1 \tag{9.56}$$

で与えられる．これを用いると，任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ を，コヒーレント状態 $|\beta\rangle$ を用いて

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\pi} \int |\beta\rangle\langle\beta|\psi\rangle \mathrm{d}^2\beta$$

と展開することができる．ここで $|\psi\rangle$ としてとくに $|\alpha\rangle$ をとり，(9.55)を用いると，コヒーレント状態の非直交性のため

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\pi} \int |\beta\rangle\langle\beta|\alpha\rangle \mathrm{d}^2\alpha = \frac{1}{\pi} \int |\beta\rangle \mathrm{e}^{\beta^*\alpha - |\alpha|^2/2 - |\beta|^2/2} \mathrm{d}^2\beta \tag{9.57}$$

となる．すなわち，任意の与えられたコヒーレント状態は，その他のコヒーレント状態を用いて展開することができる．このことは，コヒーレント状態が1次独立ではなく，コヒーレント状態の全体が過剰完全系を構成していることを意味する．

次にコヒーレント状態に対する不確定性関係を調べよう．このとき

$$\bar{q} = \langle\alpha|\hat{q}|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \langle\alpha|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} (\alpha+\alpha^*),$$
$$\bar{p} = \langle\alpha|\hat{p}|\alpha\rangle = -i\sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}} \langle\alpha|(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle = -\frac{1}{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega_0}{2}} (\alpha-\alpha^*)$$

である．ここで $\langle\alpha|\hat{a}^\dagger=\{\hat{a}|\alpha\rangle\}^\dagger=\alpha^*\langle\alpha|$ を用いている．同様にして，

$$\overline{q^2}=\langle\alpha|\hat{q}^2|\alpha\rangle=\frac{\hbar}{2m\omega_0}\langle\alpha|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|\alpha\rangle$$

$$=\frac{\hbar}{2m\omega_0}[(\alpha+\alpha^*)^2+1],$$

$$\overline{p^2}=\langle\alpha|\hat{p}^2|\alpha\rangle=-(m\hbar\omega_0/2)[(\alpha-\alpha^*)^2-1]$$

となる．これらから，

$$\overline{(\varDelta p)^2}=\overline{(p-\bar{p})^2}=m\hbar\omega_0/2, \qquad \overline{(\varDelta q)^2}=\overline{(q-\bar{q})^2}=\hbar/2m\omega_0$$

をえる．したがって

$$\sqrt{\overline{(\varDelta q)^2}\cdot\overline{(\varDelta p)^2}}=\hbar/2. \tag{9.58}$$

すなわち，コヒーレント状態は，基底状態と同じく不確定性が最小値の状態である．

コヒーレント状態を用いて，密度演算子

$$\hat{\rho}=|\alpha\rangle\langle\alpha| \tag{9.59}$$

をつくると，その行列要素は(9.51)より

$$\rho_{m,n}=\langle m|\hat{\rho}|n\rangle=\langle m|\alpha\rangle\langle\alpha|n\rangle=\mathrm{e}^{-|\alpha|^2}\frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}}\cdot\frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}} \tag{9.60}$$

と表わされる．この対角要素は，**Poisson 分布**

$$\rho_{n,n}=\mathrm{e}^{-|\alpha|^2}\frac{|\alpha|^{2n}}{n!} \tag{9.61}$$

を与える．コヒーレント状態における Heisenberg 演算子 $\hat{q}(t)$ の平均値は

$$\langle\!\langle q(t)\rangle\!\rangle=\mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{q}(t))=\sum_n\langle n|\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{q}(t)|n\rangle$$

$$=\sum_n\langle\alpha|\hat{q}(t)|n\rangle\langle n|\alpha\rangle=\langle\alpha|\hat{q}(t)|\alpha\rangle$$

で与えられるから，これに(9.15)を代入すると

$$\langle\!\langle q(t)\rangle\!\rangle=\sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,[\langle\alpha|\hat{a}|\alpha\rangle\mathrm{e}^{-i\omega_0t}+\langle\alpha|\hat{a}^\dagger|\alpha\rangle\mathrm{e}^{i\omega_0t}]$$

$$=\sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,[\alpha\mathrm{e}^{-i\omega_0t}+\alpha^*\mathrm{e}^{i\omega_0t}]$$

$$=\sqrt{\hbar/2m\omega_0}\,r(\mathrm{e}^{-i(\omega_0t-\theta)}+\mathrm{e}^{i(\omega_0t-\theta)})$$

$$=2r\sqrt{\hbar/2m\omega_0}\cos(\omega_0t-\theta) \tag{9.62}$$

である．すなわち，熱平衡状態の場合の(9.48)とは違って，コヒーレント状態

では調和振動子の位置の平均値は，古典力学のときと同様に，一定の振幅 $A=2r\sqrt{\hbar/2m\omega_0}$ と一定の位相定数 θ をもって振動する．この位相の一定性こそ，第8章で説明するように，レーザー光の可干渉性をもたらすのである．

コヒーレント状態のもつ物理的意味をより明確にするために，その位置表示 $\langle q|\alpha\rangle=\psi_\alpha(q)$ を調べよう．(9.54)より

$$|\alpha\rangle = \langle 0|\alpha\rangle e^{\alpha\hat{a}^\dagger}|0\rangle = \langle 0|\alpha\rangle \exp\left[\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\alpha\hat{q}-i\frac{\alpha}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}\hat{p}\right]|0\rangle$$
$$= \langle 0|\alpha\rangle e^{-\alpha^2/4}\exp\left[\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\alpha\hat{q}\right]\cdot\exp\left[-i\frac{\alpha}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}\hat{p}\right]|0\rangle$$

である．ここで3番目の等号では(5.44)の公式を用いている．この表式の位置表示をとると

$$\psi_\alpha(q) = \langle 0|\alpha\rangle e^{-\alpha^2/4}\exp\left[\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\alpha q\right]\cdot\exp\left[-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\alpha\frac{d}{dq}\right]\phi_0(q) \qquad (9.63)$$

となる．ここで(9.34)と，

$$\exp\left[\beta\frac{d}{dx}\right]f(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\beta\frac{\partial}{\partial x}\right)^n f(x) = f(x+\beta)$$

を利用すると

$$\exp\left[-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\alpha\frac{d}{dq}\right]\phi_0(q) = N_0\exp\left[-\frac{m\omega_0}{2\hbar}\left(q-\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}\alpha\right)^2\right]$$

をえる．これを(9.63)に代入してまとめると

$$\psi_\alpha(q) = N_0 e^{-|\alpha|^2/2+\alpha^2/2}\exp\left[-\frac{m\omega_0}{2\hbar}\left(q-\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_0}}\alpha\right)^2\right] \qquad (9.64)$$

がえられる．ここで α を実数にとると，(9.64)は

$$\psi_\alpha(q) = N_0\exp\left[-\frac{m\omega_0}{2\hbar}\left(q-\sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_0}}\alpha\right)^2\right] \qquad (9.65)$$

となる．すなわち，コヒーレント状態 $\psi_\alpha(q)$ は，基底状態の固有関数 $\phi_0(q)$ の $q=0$ の中心の位置を $\alpha\sqrt{2\hbar/m\omega_0}$ だけずらした状態である．

最後に，コヒーレント状態の時間依存性を調べよう．このとき，

$$|\alpha(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\alpha\rangle = \langle 0|\alpha\rangle\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}e^{-i\hat{H}t/\hbar}|n\rangle$$

$$= \langle 0|\alpha\rangle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-i(n+1/2)\omega_0 t} |n\rangle$$

$$= \langle 0|\alpha\rangle e^{-i\omega_0 t/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\alpha e^{-i\omega_0 t}\hat{a}^\dagger)^n}{n!} |0\rangle$$

$$= e^{-|\alpha|^2/2} e^{-i\omega_0 t/2} \exp[\alpha e^{-i\omega_0 t}\hat{a}^\dagger] |0\rangle \qquad (9.66)$$

となる．これを(9.54)と比較すると，(9.66)の位置表示は(9.64)の右辺のαを$\alpha e^{-i\omega_0 t}$におきかえて，$e^{-i\omega_0 t/2}$の因子を追加しておけばよいことが分かる．すなわち，

$$\psi_\alpha(q,t) = e^{-|\alpha|^2/2} \cdot e^{-i\omega_0 t/2} \cdot \exp\left[\frac{\alpha^2}{2} e^{-2i\omega_0 t}\right]$$
$$\times N_0 \exp\left[-\frac{m\omega_0}{2\hbar}\left(q - \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega_0}}\alpha e^{-i\omega_0 t}\right)^2\right].$$

ここでαを実数にとり，$q_0 = \alpha\sqrt{2\hbar/m\omega_0}$，$\xi_0 = q_0\sqrt{m\omega_0/\hbar}$および$\xi = q\sqrt{m\omega_0/\hbar}$とおくと

$$\psi_\alpha(q,t) = N_0 \exp\left[-\frac{m\omega_0}{2\hbar}(q - q_0\cos\omega_0 t)^2\right]$$
$$\times \exp[-i\{\omega_0 t/2 + \xi\xi_0 \sin\omega_0 t - (1/4)\xi_0^2 \sin 2\omega_0 t\}]$$

となる．したがって，位置qにおける存在確率は

$$|\psi_\alpha(q,t)|^2 = N_0^2 e^{-(m\omega_0/\hbar)[q - q_0\cos\omega_0 t]^2} \qquad (9.67)$$

で与えられる．すなわち，調和振動子の固有状態$\psi_n(q,t) = e^{-iE_n t/\hbar}\phi_n(q)$では，調和振動子のイメージに反してその存在確率$|\psi_n(q,t)|^2 = |\phi_n(q)|^2$は少しも振動しないのに対して，(9.67)は，状態関数の形をくずすことなく，古典力学における調和振動子と同様に，$|\psi_\alpha(q,t)|^2$の中心の位置が角振動数ω_0で振動する．このコヒーレント状態は，1926年，Schrödingerが，$|\psi(q,t)|^2$を粒子の密度分布を表わすと解釈したとき，その分布状態をくずさない運動が可能である例を示すために導入したものである．

問21　(9.49)のコヒーレント表示の定義式の位置表示をとってえられる微分方程式を解いて，(9.65)をみちびけ．ただしαは実数であるとする．

第3章

中心力ポテンシャル内の1粒子問題

§1 極座標系の導入

(1) 質量中心と相対座標

質量 m_1 と m_2 の2粒子からなる系を考え，それらの間にはたらく中心力ポテンシャルを $V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$ とする．ここで $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ は，それぞれの粒子の位置座標である．古典力学では，このような2粒子系の問題は，質量中心の位置ベクトルと相対座標ベクトル

$$\boldsymbol{R} = (m_1\boldsymbol{r}_1+m_2\boldsymbol{r}_2)/(m_1+m_2), \qquad \boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2 \tag{1.1}$$

を利用することにより，1粒子系の問題に帰着させることができた．量子力学でも同様のことがいえるはずである．2粒子系の Schrödinger の方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\triangle_1-\frac{\hbar^2}{2m_2}\triangle_2+V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)\right]\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;t) \tag{1.2}$$

で与えられる．この方程式を(1.1)の $\boldsymbol{R}$ と $\boldsymbol{r}$ を変数とする方程式にするには，(1.1)の関係を利用して変数変換をしさえすればよい．しかし，この種の計算は意外に面倒なもので，また見通しもよくない．とくに多粒子系などになるとどうしてよいか分からなくなってしまう．そこでここでは，どのような場合にも適用できる正準量子化の方法を利用することにする．

(1.2)の Schrödinger の方程式で記述される2粒子系のラグランジアンは，$\dot{\boldsymbol{r}}_i=\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i/\mathrm{d}t$ と書くと

$$L = m_1\dot{\boldsymbol{r}}_1{}^2/2+m_2\dot{\boldsymbol{r}}_2{}^2/2-V(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) \tag{1.3}$$

である．このとき，$\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ に正準共役な運動量 $\boldsymbol{p}_1$ と $\boldsymbol{p}_2$ は

$$\boldsymbol{p}_1 = \partial L/\partial\dot{\boldsymbol{r}}_1 = m_1\dot{\boldsymbol{r}}_1, \qquad \boldsymbol{p}_2 = \partial L/\partial\dot{\boldsymbol{r}}_2 = m_2\dot{\boldsymbol{r}}_2 \tag{1.4}$$

で与えられる．一方，(1.1)を微分すると

$$\dot{\boldsymbol{R}} = (m_1\dot{\boldsymbol{r}}_1 + m_2\dot{\boldsymbol{r}}_2)/(m_1+m_2), \qquad \dot{\boldsymbol{r}} = \dot{\boldsymbol{r}}_1 - \dot{\boldsymbol{r}}_2 \tag{1.5}$$

である．これを逆に解いて(1.3)に代入すれば，容易に

$$L = M\dot{\boldsymbol{R}}^2/2 + \mu\dot{\boldsymbol{r}}^2/2 - V(\boldsymbol{r}) \tag{1.6}$$

となることが示される．ここで $M=m_1+m_2$，$\mu=m_1m_2/(m_1+m_2)$ で，μ は**換算質量**である．(1.6)から $\boldsymbol{R}$ と $\boldsymbol{r}$ に正準共役な運動量は，それぞれ

$$\boldsymbol{P} = \partial L/\partial\dot{\boldsymbol{R}} = M\dot{\boldsymbol{R}}, \qquad \boldsymbol{p} = \partial L/\partial\dot{\boldsymbol{r}} = \mu\dot{\boldsymbol{r}} \tag{1.7}$$

で与えられる．(1.7)の右辺に(1.5)を代入し，さらに(1.4)を用いると

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2, \qquad \boldsymbol{p} = (m_2\boldsymbol{p}_1 - m_1\boldsymbol{p}_2)/(m_1+m_2) \tag{1.8}$$

となる．ここまでは古典論である．

ここで量子力学に移行して，正準交換関係

$$[\hat{r}_{1,i}, \hat{p}_{1,j}] = [\hat{r}_{2,i}, \hat{p}_{2,j}] = i\hbar\delta_{i,j} \tag{1.9}$$

を要求する．ここで添字の i と j はそれぞれの演算子の座標成分を示すものである．(1.9)以外の交換関係はすべて0である．ここで，(1.1)と(1.8)を用いると，

$$[\hat{R}_i, \hat{P}_j] = [\hat{r}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{i,j} \tag{1.10}$$

となる．したがって，(1.1)と(1.8)を演算子間の変換としたとき，それらは正準変換である．

さて，2粒子系のハミルトニアン

$$H = \boldsymbol{p}_1{}^2/2m_1 + \boldsymbol{p}_2{}^2/2m_2 + V(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$$

に，(1.1)と(1.8)の逆変換を代入すれば，

$$H = \boldsymbol{P}^2/2M + \boldsymbol{p}^2/2\mu + V(\boldsymbol{r})$$

となる．したがって，新変数 $\boldsymbol{R}$ と $\boldsymbol{r}$ で表わしたSchrödingerの方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\phi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r};t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\triangle_{\boldsymbol{R}} - \frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle_{\boldsymbol{r}} + V(\boldsymbol{r})\right]\phi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r};t) \tag{1.11}$$

となる．ここで質量中心の運動量 $\hat{\boldsymbol{P}}$ の固有値を $\boldsymbol{P}'$ として，

$$\phi(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r};t) = \mathrm{e}^{i\boldsymbol{P}'\cdot\boldsymbol{R}/\hbar - i(\boldsymbol{P}'^2/2M)t/\hbar}\psi(\boldsymbol{r},t)$$

とおくと，

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle_{\boldsymbol{r}} + V(\boldsymbol{r})\right]\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{1.12}$$

となり，(1.2)の2粒子系の問題は，換算質量 μ をもつ1粒子系の問題に帰着

する．

(2) 角運動量と極座標系

古典力学では，中心力の作用のもとで，その中心のまわりの軌道角運動量の値が保存する．したがって，(1.12)の方程式で記述される系でも軌道角運動量が重要な役割を果すと考えられる．量子力学の**軌道角運動量**は，エルミート演算子

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \quad \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \quad \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x \tag{1.13}$$

で定義される．位置演算子 $(\hat{x},\hat{y},\hat{z})$ と運動量演算子 $(\hat{p}_x,\hat{p}_y,\hat{p}_z)$ の間の正準交換関係を利用すると，(1.13)の角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}$ の3個の成分の間に次の交換関係が成立することが分かる．すなわち

$$[\hat{L}_x,\hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \quad [\hat{L}_y,\hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \quad [\hat{L}_z,\hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y. \tag{1.14}$$

また，$\hat{\boldsymbol{L}}^2=\hat{L}_x{}^2+\hat{L}_y{}^2+\hat{L}_z{}^2$ については

$$[\hat{L}_x,\hat{\boldsymbol{L}}^2] = [\hat{L}_y,\hat{\boldsymbol{L}}^2] = [\hat{L}_z,\hat{\boldsymbol{L}}^2] = 0 \tag{1.15}$$

であることも容易に示される．(1.14)の交換不能性のため，$\hat{L}_x, \hat{L}_y$ および $\hat{L}_z$ の同時固有状態は一般には存在しない．しかし，$\hat{L}_x|\psi\rangle=\hat{L}_y|\psi\rangle=\hat{L}_z|\psi\rangle=0$ をみたす球対称な状態だけは例外で，このとき角運動量のすべての成分が確定値0をとる．

さていま，(1.12)のハミルトニアン $\hat{H}_{\boldsymbol{r}}=\hat{\boldsymbol{p}}^2/2\mu+V(\hat{\boldsymbol{r}})$ を，動径座標 $r=\sqrt{x^2+y^2+z^2}$ と $\boldsymbol{L}^2$ で表わすために，位置表示

$$p_x = (\hbar/i)\partial/\partial x, \quad p_y = (\hbar/i)\partial/\partial y, \quad p_z = (\hbar/i)\partial/\partial z$$

をとる．(1.13)の定義式を用い，演算子 $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{p}$ の順序に注意しながら，次のように変形をする．

$$\begin{aligned} L_x{}^2 &= (yp_z - zp_y)(yp_z - zp_y) \\ &= y^2p_z{}^2 + z^2p_y{}^2 - yzp_zp_y - zyp_yp_z + i\hbar(yp_y + zp_z). \end{aligned}$$

$L_y{}^2$ と $L_z{}^2$ についても同様の変形をして加え合わせると

$$\boldsymbol{L}^2 = \boldsymbol{r}^2\cdot\boldsymbol{p}^2 - \boldsymbol{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p} + 2i\hbar(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) \tag{1.16}$$

をえる．ただしここで $\boldsymbol{r}=(x,y,z)$，$\boldsymbol{r}^2=x^2+y^2+z^2$ であり，また右辺の第2項は，$(r_1,r_2,r_3)=(x,y,z)$ とすると

$$\boldsymbol{r}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{p} = \sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3} r_i r_j p_j p_i$$

である．ここで，勾配 $\nabla\psi$ の $\boldsymbol{r}$ 方向の成分は $\partial\psi/\partial r$ で与えられるから，$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}=(\hbar/i)r\partial/\partial r$ である．したがって，(1.16)の右辺の第2項は，

$$-r[r(\hbar/i)\partial/\partial r](\hbar/i)\partial\psi/\partial r = \hbar^2 r^2 \partial^2\psi/\partial r^2$$

となる．すなわち

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}^2 &= r^2\boldsymbol{p}^2+\hbar^2 r^2\partial^2/\partial r^2+2\hbar^2 r\partial/\partial r\\ &= r^2\boldsymbol{p}^2+\hbar^2\partial/\partial r(r^2\partial/\partial r)\end{aligned} \tag{1.17}$$

である．一方

$$\begin{aligned}[r, L_x] &= [r, yp_z-zp_y] = y[r, p_z]-z[r, p_y]\\ &= i\hbar(y\partial r/\partial z-z\partial r/\partial y) = i\hbar(yz/r-zy/r) = 0.\end{aligned}$$

同様にして，$[r, L_y]=[r, L_z]=0$ となるから，$[r, \boldsymbol{L}^2]=0$ である．したがって，(1.17)を r^2 で割り算をするとき，$\boldsymbol{L}^2$ と r^2 の順序を気にせずに

$$\boldsymbol{p}^2 = -\hbar^2\triangle_r = -\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\boldsymbol{L}^2}{r^2} \tag{1.18}$$

と書くことができる．(1.18)を(1.12)に代入することにより，動径座標 r を用いて(1.12)を次のように表わすことができる．

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2}+V(r)\right]\psi. \tag{1.19}$$

ここで，(1.19)の右辺の $\boldsymbol{L}^2/2\mu r^2$ は遠心力ポテンシャルである．古典的に考えると，角運動量 L の粒子が角速度 ω で，半径 r の円運動をしているとき，$\omega=L/\mu r^2$ である．この回転運動によって生じる遠心力は $\mu\omega^2 r=L^2/\mu r^3$ である．したがって，この力を与えるポテンシャル関数は $L^2/2\mu r^2$ で表わされることになる．

なおここで動径運動量 p_r を

$$p_r = (\hbar/i)r^{-1}\partial/\partial r\cdot r = (\hbar/i)[\partial/\partial r+1/r] \tag{1.20}$$

で定義すると，(1.19)の右辺のハミルトニアンは

$$H = p_r{}^2/2\mu+\boldsymbol{L}^2/2\mu r^2+V(r)$$

と書くことができる．(1.20)の p_r は $[r, p_r]=i\hbar$ の交換関係をみたしているが，$r\geqq 0$ の条件があるので，この交換関係は正準交換関係ではない．しかし p_r は，$r\to\infty$ で消え，$\lim_{r\to 0} r\psi(r)=0$ の条件をみたす任意の状態関数 $\psi(r)$ に対してはエルミートである．なぜなら上の条件をみたす任意の ψ_1 と ψ_2 に対して

$$\int_0^\infty \psi_1{}^*(p_r\psi_2)r^2\mathrm{d}r - \int_0^\infty (p_r\psi_1)^*\psi_2 r^2\mathrm{d}r$$
$$= \frac{\hbar}{i}\int_0^\infty \psi_1{}^*\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r\psi_2)\cdot r^2\mathrm{d}r + \frac{\hbar}{i}\int_0^\infty \frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}(r\psi_1{}^*)\cdot\psi_2 r^2\mathrm{d}r$$
$$= \frac{\hbar}{i}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}[(r\psi_1)^*(r\psi_2)]\mathrm{d}r = \frac{\hbar}{i}[(r\psi_1)^*(r\psi_2)|_{r\to\infty} - (r\psi_1)^*(r\psi_2)|_{r\to 0}]$$
$$= 0$$

となるからである．しかし，p_r はエルミートではあってもオブザーバブルではない．p_r の固有値を p' としたとき，$p_r\psi = (\hbar/i)r^{-1}\partial/\partial r(r\psi) = p'\psi$ の解は，$\psi = \mathrm{e}^{ip'r/\hbar}/r$ で与えられ，これは上の $r\psi(r)\underset{r\to 0}{\longrightarrow} 0$ の条件をみたさない．すなわち，エルミート条件をみたす固有関数の完全系が存在しないからである．

中心力の作用のもとにある体系は，図 3.1 のような極座標系を用いて記述すると便利なことはよく知られている．そこで

$$x = r\sin\theta\cdot\cos\varphi, \quad y = r\sin\theta\cdot\sin\varphi, \quad z = r\cos\theta \qquad (1.21)$$

として，(1.13)の角運動量 $\boldsymbol{L}$ を極座標系で表わすことを考えよう．しかし，(1.21)を用いて機械的に変数変換をしようとすると，計算はまことに面倒なも

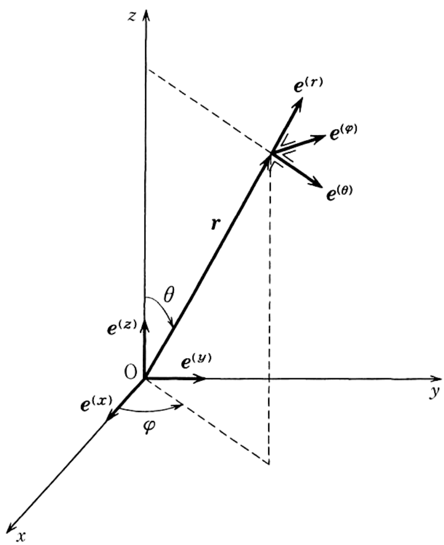


図 3.1　極座標系

のになる．そこでここでは次のような方法をとることにする．カーテシアン座標系(x,y,z)における基本ベクトルを$\boldsymbol{e}^{(x)}, \boldsymbol{e}^{(y)}, \boldsymbol{e}^{(z)}$，極座標系のそれらを$\boldsymbol{e}^{(r)}$, $\boldsymbol{e}^{(\theta)}$, $\boldsymbol{e}^{(\varphi)}$と書くと，これらのベクトルは直交するから

$$\boldsymbol{e}^{(r)}\cdot\boldsymbol{e}^{(\theta)} = \boldsymbol{e}^{(\theta)}\cdot\boldsymbol{e}^{(\varphi)} = \boldsymbol{e}^{(\varphi)}\cdot\boldsymbol{e}^{(r)} = 0 \tag{1.22}$$

である．これらの基本ベクトルを用いると，原点Oから引いた任意の位置ベクトル$\boldsymbol{r}$は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r} &= x\boldsymbol{e}^{(x)}+y\boldsymbol{e}^{(y)}+z\boldsymbol{e}^{(z)}\\ &= r\sin\theta\cdot\cos\varphi\,\boldsymbol{e}^{(x)}+r\sin\theta\cdot\sin\varphi\,\boldsymbol{e}^{(y)}+r\cos\theta\,\boldsymbol{e}^{(z)}\end{aligned} \tag{1.23}$$

である．ここで$\boldsymbol{r}$として$\boldsymbol{e}^{(r)}$を選ぶと

$$\boldsymbol{e}^{(r)}(\theta,\varphi) = \sin\theta\cdot\cos\varphi\,\boldsymbol{e}^{(x)}+\sin\theta\cdot\sin\varphi\,\boldsymbol{e}^{(y)}+\cos\theta\,\boldsymbol{e}^{(z)} \tag{1.24}$$

となる．また図3.1から

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}^{(\varphi)}(\theta,\varphi) &= -\sin\varphi\,\boldsymbol{e}^{(x)}+\cos\varphi\,\boldsymbol{e}^{(y)},\\ \boldsymbol{e}^{(\theta)}(\theta,\varphi) &= \boldsymbol{e}^{(\varphi)}\times\boldsymbol{e}^{(r)}\\ &= \cos\theta\cdot\cos\varphi\,\boldsymbol{e}^{(x)}+\cos\theta\cdot\sin\varphi\,\boldsymbol{e}^{(y)}-\sin\theta\,\boldsymbol{e}^{(z)}.\end{aligned} \tag{1.25}$$

ここで，(1.24)と(1.25)をθおよびφで微分して，その結果を(1.24)および(1.25)と比較すると

$$\begin{aligned}&\partial\boldsymbol{e}^{(r)}/\partial\theta = \boldsymbol{e}^{(\theta)}, \quad \partial\boldsymbol{e}^{(\theta)}/\partial\theta = -\boldsymbol{e}^{(r)}, \quad \partial\boldsymbol{e}^{(\varphi)}/\partial\theta = 0,\\ &\partial\boldsymbol{e}^{(r)}/\partial\varphi = \sin\theta\,\boldsymbol{e}^{(\varphi)}, \quad \partial\boldsymbol{e}^{(\theta)}/\partial\varphi = \cos\theta\,\boldsymbol{e}^{(\varphi)},\\ &\partial\boldsymbol{e}^{(\varphi)}/\partial\varphi = -\sin\theta\,\boldsymbol{e}^{(r)}-\cos\theta\,\boldsymbol{e}^{(\theta)}\end{aligned} \tag{1.26}$$

がえられる．$\boldsymbol{r}=\boldsymbol{e}^{(r)}r$の全微分を求めると，(1.26)より

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\boldsymbol{r} &= \boldsymbol{e}^{(r)}\mathrm{d}r+r\mathrm{d}\boldsymbol{e}^{(r)} = \boldsymbol{e}^{(r)}\mathrm{d}r+r(\partial\boldsymbol{e}^{(r)}/\partial\theta\cdot\mathrm{d}\theta+\partial\boldsymbol{e}^{(r)}/\partial\varphi\cdot\mathrm{d}\varphi)\\ &= \boldsymbol{e}^{(r)}\mathrm{d}r+\boldsymbol{e}^{(\theta)}r\mathrm{d}\theta+\boldsymbol{e}^{(\varphi)}r\sin\theta\,\mathrm{d}\varphi\end{aligned}$$

となる．さて，スカラー関数$\psi(\boldsymbol{r})$の全微分は$\mathrm{d}\psi=\nabla\psi\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}$である．一方，それは次のように表わすこともできる．

$$\begin{aligned}\mathrm{d}\psi &= \frac{\partial\psi}{\partial r}\mathrm{d}r+\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\mathrm{d}\theta+\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi\\ &= \frac{\partial\psi}{\partial r}\mathrm{d}r+\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\cdot r\mathrm{d}\theta+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\cdot r\sin\theta\,\mathrm{d}\varphi\\ &= [\boldsymbol{e}^{(r)}\partial\psi/\partial r+\boldsymbol{e}^{(\theta)}r^{-1}\partial\psi/\partial\theta+\boldsymbol{e}^{(\varphi)}(r\sin\theta)^{-1}\partial\psi/\partial\varphi]\\ &\quad\cdot[\boldsymbol{e}^{(r)}\mathrm{d}r+\boldsymbol{e}^{(\theta)}r\mathrm{d}\theta+\boldsymbol{e}^{(\varphi)}r\sin\theta\,\mathrm{d}\varphi]\end{aligned}$$

$$= \left[\boldsymbol{e}^{(r)}\frac{\partial\psi}{\partial r}+\boldsymbol{e}^{(\theta)}\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}+\boldsymbol{e}^{(\varphi)}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right]\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}.$$

これを $\mathrm{d}\psi=\nabla\psi\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ と比較すると

$$\nabla\psi = \boldsymbol{e}^{(r)}\frac{\partial\psi}{\partial r}+\boldsymbol{e}^{(\theta)}\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial\theta}+\boldsymbol{e}^{(\varphi)}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}. \tag{1.27}$$

以上の準備のもとで軌道角運動量演算子の極座標表示を求める．(1.27)の結果を利用すると

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L} &= \boldsymbol{r}\times\frac{\hbar}{i}\nabla = \frac{\hbar}{i}r\boldsymbol{e}^{(r)}\times\left(\boldsymbol{e}^{(r)}\frac{\partial}{\partial r}+\boldsymbol{e}^{(\theta)}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\theta}+\boldsymbol{e}^{(\varphi)}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ &= \frac{\hbar}{i}\left[\boldsymbol{e}^{(\varphi)}\frac{\partial}{\partial\theta}-\boldsymbol{e}^{(\theta)}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right] \qquad (1.28)\end{aligned}$$

である．これに(1.25)を代入して整理すると

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L} = \frac{\hbar}{i}\Big[&\boldsymbol{e}^{(x)}\left(-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cos\varphi\cdot\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)+\boldsymbol{e}^{(y)}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\sin\varphi\cdot\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\\ &+\boldsymbol{e}^{(z)}\frac{\partial}{\partial\varphi}\Big] \qquad (1.29)\end{aligned}$$

となる．すなわち，$\boldsymbol{L}$ の x,y,z 成分を極座標系で表わすと

$$L_x = \frac{\hbar}{i}\left[-\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\cos\varphi\cdot\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \qquad L_y = \frac{\hbar}{i}\left[+\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\sin\varphi\cdot\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right],$$

$$L_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} \tag{1.30}$$

である．

次に $\boldsymbol{L}^2$ の極座標表示を求めるには，(1.29)よりも(1.28)を用いたほうが計算が簡単である．すなわち，

$$\boldsymbol{L}^2 = -\hbar^2\left[\boldsymbol{e}^{(\varphi)}\frac{\partial}{\partial\theta}-\boldsymbol{e}^{(\theta)}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\cdot\left[\boldsymbol{e}^{(\varphi)}\frac{\partial}{\partial\theta}-\boldsymbol{e}^{(\theta)}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]$$

において，例えば右辺のはじめの括弧のなかの第 2 項と第 2 の括弧のなかの第 1 項の積は，(1.22)と(1.26)より

$$-\boldsymbol{e}^{(\theta)}\cdot\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\boldsymbol{e}^{(\varphi)}\frac{\partial}{\partial\theta}\right) = -\boldsymbol{e}^{(\theta)}\cdot\left[\boldsymbol{e}^{(\varphi)}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi\partial\theta}+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial\boldsymbol{e}^{(\varphi)}}{\partial\varphi}\frac{\partial}{\partial\theta}\right]$$

$$= \frac{1}{\sin\theta}\boldsymbol{e}^{(\theta)}\cdot(\sin\theta\,\boldsymbol{e}^{(r)}+\cos\theta\,\boldsymbol{e}^{(\theta)})\frac{\partial}{\partial\theta} = \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}$$

と計算される．このような計算により

$$\boldsymbol{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{1.31}$$

がえられる．

ここで定常状態を考えて，(1.19)で $\psi(\boldsymbol{r},t)=\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\phi(\boldsymbol{r})$ とおくと，固有値方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\phi}{\partial r}\right)+\left(\frac{\boldsymbol{L}^2}{2\mu r^2}+V(r)\right)\phi = E\phi \tag{1.32}$$

をえる．$\boldsymbol{L}^2$ の固有値方程式を

$$\boldsymbol{L}^2 Y(\theta,\varphi) = \hbar^2\lambda Y(\theta,\varphi) \tag{1.33}$$

と書き，$\phi(\boldsymbol{r})=R(r)Y(\theta,\varphi)$ とおいて，これを(1.32)に代入して(1.33)を用いると，動径関数 $R(r)$ の方程式として

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R}{\mathrm{d}r}\right)+\left(\frac{\hbar^2\lambda}{2\mu r^2}+V(r)\right)R = ER \tag{1.34}$$

がえられる．この方程式で $R(r)=u(r)/r$ とおくと，左辺の第1項の微分を含む項は $r^{-2}\mathrm{d}/\mathrm{d}r(r^2\mathrm{d}R/\mathrm{d}r)=r^{-1}\mathrm{d}^2u/\mathrm{d}r^2$ となるから，(1.34)は

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\mathrm{d}^2u}{\mathrm{d}r^2}+\left(\frac{\hbar^2\lambda}{2\mu r^2}+V(r)\right)u(r) = Eu(r) \tag{1.35}$$

となる．この形はポテンシャルに角運動量による遠心力ポテンシャルが加わることを別にすれば，1次元系の Schrödinger の固有値方程式と同形である．なお，次節に述べるように，(1.33)の角運動量に関する固有値問題の解として与えられる固有値は

$$\lambda = l(l+1), \qquad l = 0,1,2,3,\cdots \tag{1.36}$$

である．したがって，$l=0$ のとき，(1.35)は完全に1次元方程式に帰着する．

ここで，(1.35)の解のみたすべき境界条件を調べておこう．束縛状態では，固有関数は1に規格化されるから

$$\int_0^\infty R^2(r)r^2\mathrm{d}r\int_0^\pi\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\,|Y(\theta,\varphi)|^2$$

$$= \int_0^\infty |u(r)|^2 \mathrm{d}r \int_0^\pi \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi |Y(\theta,\varphi)|^2 = 1$$

である．したがってまず，$u(r\to\infty)\to 0$ が要求される．問題は原点 $r=0$ における条件である．いま，$V(r)$ は原点 O の近傍で r^{-1} か，それよりも弱く発散すると仮定しよう．このとき(1.35)は，$r\to 0$ で

$$-(\hbar^2/2\mu)\mathrm{d}^2u/\mathrm{d}r^2 + \hbar^2 l(l+1)u/2\mu r^2 = 0$$

と近似することができる．この方程式の解は，任意定数 a と b を用いて，$u(r)=ar^{l+1}+br^{-l}$ で与えられる．したがって，$R(r)=u(r)/r=ar^l+br^{-(l+1)}$ である．$l\neq 0$ のときには

$$\int_0 R^2(r)r^2\mathrm{d}r \cong b\int_0 \frac{\mathrm{d}r}{r^{2l}} \longrightarrow \infty$$

となり，積分は原点で発散する．したがってこのとき，$b=0$ でなくてはならない．$l=0$ のときには，$R(r)\cong br^{-1}$ で，

$$\int_0 R^2(r)r^2\mathrm{d}r = b\int_0 \mathrm{d}r$$

となり，積分は原点で収束する．しかしこのときに，$\phi(\boldsymbol{r})\propto R(r)\cong b/r$ であり，これを(1.32)に代入すれば，$\triangle(1/r)=-4\pi\delta^3(\boldsymbol{r})$ の関係より $(H-E)\phi(\boldsymbol{r})=(2\pi\hbar^2/\mu)\delta^3(\boldsymbol{r})$ となり，$l=0$ の解は原点で Schrödinger の方程式をみたさない．したがって，(1.35)の方程式の解として許されるのは，原点 O の近くで $u(r)\cong ar^{l+1}$ の形のものだけである．すなわち，すべての l の値に対して

$$u(0) = 0 \tag{1.37}$$

の条件が要求される*.

問 22　$a\geqq r\geqq 0$ で $V(r)=-V_0\,(V_0>0)$，$r>a$ で $V(r)=0$ の井戸型ポテンシャル内にある粒子の $l=0$ の場合の束縛状態のエネルギー固有値を求め，$V_0a^2<\pi^2\hbar^2/8\mu$ のとき，束縛状態が存在しないことを示せ．

---

*　なお，第1章(3.12)の確率の保存則が成立するためには，$r=0$ の原点の近傍で $j_r\cdot 4\pi r^2|_{r\to 0}=0$ の条件が要求される．これは原点からの確率の流れの湧き出しがないことを意味する．この条件が成立するためには，$\varepsilon>0$ のとき $\psi\sim r^{-1/2+\varepsilon}$ が要求されるから，$\sqrt{r}\psi|_{r\to 0}=0$ でなければならない．したがって，状態関数 ψ が確率波として意味をもつためには，(1.37)の条件 $r\psi|_{r\to 0}=0$ だけでは不十分で，$\sqrt{r}\psi|_{r\to 0}=0$ でなければならない．なお，この章の(3.15)の $\psi\propto j_l(\rho)$ は，(3.13)から分かるように，これらの両方の条件をみたしている．

§2　角運動量の固有値問題

軌道角運動量の固有値問題(1.33)からはじめよう．まず

$$L_x = \hbar M_x, \qquad L_y = \hbar M_y, \qquad L_z = \hbar M_z \tag{2.1}$$

とおいて，$\hbar$ を消去すると，(1.14)と(1.15)の交換関係は，それぞれ

$$[M_x, M_y] = iM_z, \qquad [M_y, M_z] = iM_x, \qquad [M_z, M_x] = iM_y, \tag{2.2}$$

$$[M_x, \boldsymbol{M}^2] = [M_y, \boldsymbol{M}^2] = [M_z, \boldsymbol{M}^2] = 0 \tag{2.3}$$

となる．また，(1.31)を(1.33)に代入すると

$$-\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y(\theta,\varphi) = \lambda Y(\theta,\varphi) \tag{2.4}$$

である．ここで $Y(\theta,\varphi)=\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$ とおくと

$$-\frac{1}{\Phi}\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2} = \frac{\sin^2\theta}{\Theta}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)+\lambda\Theta\right]$$

がえられる．この式の左辺は φ だけの関数で，右辺は θ だけの関数であるから，これらが φ と θ の値に関係なくいつも一致するためには，両辺が定数でなくてはならない．この分離定数を m^2 とおくと，(2.4)は次の2個の方程式に分解される．すなわち

$$\frac{\mathrm{d}^2\Phi}{\mathrm{d}\varphi^2}+m^2\Phi = 0, \tag{2.5}$$

$$-\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}\Theta}{\mathrm{d}\theta}\right)+\frac{m^2}{\sin^2\theta}\Theta = \lambda\Theta. \tag{2.6}$$

(2.5)の解は，明らかに

$$\Phi(\varphi) = \mathrm{e}^{im\varphi} \tag{2.7}$$

であるが，普通はここで(2.7)の1価性 $\Phi(\varphi)=\Phi(\varphi+2\pi)$ を仮定して

$$m = 0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots \tag{2.8}$$

を結論する．しかし，量子力学で要求されるのは，確率の1価性であって，状態関数の1価性ではない*．(2.7)の場合，m の値に無関係に $|\Phi(\varphi)|^2=1$ であって，これからは(2.8)はえられない．また，(2.6)の微分方程式を解くことも

* 後に述べるように，スピン1/2のとき固有関数は2価である．

難しそうである．そこでここでは，第2章の調和振動子のときと同じ方法を用いて，問題を1階の微分方程式を解くことに帰着させることにする．

これまでは，角運動量を(1.13)で定義し，これから(2.2)と(2.3)の交換関係を導いた．しかしこれからは，逆に(2.2)の交換関係をみたすオブザーバブルとして角運動量を定義し，その交換関係にもとづいて，角運動量の性質を調べることにする．この**一般化された角運動量演算子**を軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}=\hbar\hat{\boldsymbol{M}}$ と区別するため $\hbar\hat{\boldsymbol{J}}$ と書くと，それは交換関係

$$[\hat{J}_x,\hat{J}_y]=i\hat{J}_z,\quad [\hat{J}_y,\hat{J}_z]=i\hat{J}_x,\quad [\hat{J}_z,\hat{J}_x]=i\hat{J}_y \tag{2.9}$$

をみたすものとして定義される．(2.9)から(2.3)に対応する

$$[\hat{J}_x,\hat{\boldsymbol{J}}^2]=[\hat{J}_y,\hat{\boldsymbol{J}}^2]=[\hat{J}_z,\hat{\boldsymbol{J}}^2]=0 \tag{2.10}$$

がえられる．したがって，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_x$, $\hat{J}_y$ および $\hat{J}_z$ のうちのどれか一つの同時固有状態が存在する．そこでいま，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有状態をとり，その固有ベクトルを $|m\rangle$ と書いて，$\langle m|m\rangle=1$ であるとする．また $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有値を λ，$\hat{J}_z$ の固有値を m で表わすと，

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|m\rangle=\lambda|m\rangle,\quad \hat{J}_z|m\rangle=m|m\rangle. \tag{2.11}$$

(2.11)の第1式より，$\lambda=\langle m|\hat{\boldsymbol{J}}^2|m\rangle=|\hat{\boldsymbol{J}}|m\rangle|^2\geqq 0$ である．次に，演算子 $\hat{J}^{(+)}$ と $\hat{J}^{(-)}$ を

$$\hat{J}^{(+)}=\hat{J}_x+i\hat{J}_y,\quad \hat{J}^{(-)}=\hat{J}_x-i\hat{J}_y \tag{2.12}$$

で定義すると，(2.9)と(2.10)から

$$[\hat{J}^{(+)},\hat{\boldsymbol{J}}^2]=[\hat{J}^{(-)},\hat{\boldsymbol{J}}^2]=0, \tag{2.13}$$

$$\hat{J}_z\hat{J}^{(+)}=\hat{J}^{(+)}(\hat{J}_z+1),\quad \hat{J}_z\hat{J}^{(-)}=\hat{J}^{(-)}(\hat{J}_z-1) \tag{2.14}$$

をえる．(2.11)と(2.13)より

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{J}}^2\hat{J}^{(+)}|m\rangle&=\hat{J}^{(+)}\hat{\boldsymbol{J}}^2|m\rangle=\lambda\hat{J}^{(+)}|m\rangle,\\ \hat{\boldsymbol{J}}^2\hat{J}^{(-)}|m\rangle&=\hat{J}^{(-)}\hat{\boldsymbol{J}}^2|m\rangle=\lambda\hat{J}^{(-)}|m\rangle\end{aligned} \tag{2.15}$$

となるから，$|m\rangle$ が $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有値 λ に属する固有ベクトルであれば，$\hat{J}^{(\pm)}|m\rangle$ もまた同じ固有値 λ に属する $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有ベクトルである．また(2.14)より

$$\begin{aligned}\hat{J}_z\hat{J}^{(+)}|m\rangle&=\hat{J}^{(+)}(\hat{J}_z+1)|m\rangle=(m+1)\hat{J}^{(+)}|m\rangle,\\ \hat{J}_z\hat{J}^{(-)}|m\rangle&=\hat{J}^{(-)}(\hat{J}_z-1)|m\rangle=(m-1)\hat{J}^{(-)}|m\rangle\end{aligned} \tag{2.16}$$

である．すなわち，$\hat{J}^{(+)}|m\rangle$ は固有値 $(m+1)$ に属する $\hat{J}_z$ の固有ベクトルであり，また $\hat{J}^{(-)}|m\rangle$ は固有値 $(m-1)$ に属する $\hat{J}_z$ の固有ベクトルである．つ

まり，$\hat{J}^{(+)}$ と $\hat{J}^{(-)}$ はそれぞれ，第2章(9.26)の昇降演算子 $\hat{a}$ と $\hat{a}^{\dagger}$ と同じ性質をもつ演算子である．したがって，未定の定数 $a_m^{(\pm)}$ を用いて

$$\hat{J}^{(+)}|m\rangle = a_m^{(+)}|m+1\rangle, \quad \hat{J}^{(-)}|m\rangle = a_m^{(-)}|m-1\rangle \tag{2.17}$$

と書くことができる．

次に，(2.11)の $\hat{J}_z$ の固有値 m に上限と下限があることを示す．$\hat{\boldsymbol{J}}$ はエルミート演算子であるから，任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ に対して

$$\langle\psi|\hat{J}_x{}^2|\psi\rangle = |\hat{J}_x|\psi\rangle|^2 \geqq 0, \quad \langle\psi|\hat{J}_y{}^2|\psi\rangle = |\hat{J}_y|\psi\rangle|^2 \geqq 0 \tag{2.18}$$

である．また，$\hat{J}_x{}^2+\hat{J}_y{}^2=\hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{J}_z{}^2$ より

$$(\hat{J}_x{}^2+\hat{J}_y{}^2)|m\rangle = (\hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{J}_z{}^2)|m\rangle = (\lambda-m^2)|m\rangle$$

である．したがって

$$\langle m|(\hat{J}_x{}^2+\hat{J}_y{}^2)|m\rangle = (\lambda-m^2)\langle m|m\rangle = (\lambda-m^2) \geqq 0.$$

つまり $\lambda \geqq m^2$ で，このことは $\lambda(\geqq 0)$ の値を固定したとき，m の値に上限と下限があることを意味している．そこで m の最大値を j，最小値を j' とすると，(2.17)より

$$\hat{J}^{(+)}|m=j\rangle = 0, \quad \hat{J}^{(-)}|m=j'\rangle = 0 \tag{2.19}$$

である．$m=j$ の状態ベクトル $|m=j\rangle$ に $\hat{J}^{(-)}$ を作用させると，(2.16)により順次に固有値の値が1だけ小さい固有ベクトルがえられるから，量子数 m のとる値は j，$j-1$, $j-2, \cdots, j'$ である．

定義(2.12)と交換関係(2.9)より

$$\hat{J}^{(-)}\hat{J}^{(+)} = \hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{J}_z{}^2-\hat{J}_z, \quad \hat{J}^{(+)}\hat{J}^{(-)} = \hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{J}_z{}^2+\hat{J}_z$$

である．これらの演算子を上の $|m=j\rangle$ と $|m=j'\rangle$ に掛けると，(2.19)より

$$\hat{J}^{(-)}\hat{J}^{(+)}|m=j\rangle = (\hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{J}_z{}^2-\hat{J}_z)|m=j\rangle = (\lambda-j^2-j)|m=j\rangle = 0,$$

$$\hat{J}^{(+)}\hat{J}^{(-)}|m=j'\rangle = (\hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{J}_z{}^2+\hat{J}_z)|m=j'\rangle = (\lambda-j'^2+j')|m=j'\rangle = 0$$

となる．$|m=j\rangle \neq 0$，$|m=j'\rangle \neq 0$ であるから，上より $\lambda-j^2-j=\lambda-j'^2+j'=0$ である．すなわち，$\lambda=j(j+1)=j'(j'-1)$ である．さらに，$j(j+1)-j'(j'-1)=(j+j')(j-j'+1)=0$ において，$j \geqq j'$ であるから，$(j-j'+1)>0$．したがって，$j+j'=0$，すなわち，$j'=-j$ である．こうして，m の最大値を j としたとき，その最小値は $-j$ であると結論される．まとめると，m のとる値は

$$m = j, j-1, j-2, \cdots, -j+1, -j \tag{2.20}$$

の $(2j+1)$ 個の値である．算数の植木算によって，これら $(2j+1)$ 個の固有値

の間隔の数は $2j$ 個である．その数は0または正の整数でなければならないから，一般に j の値として許されるのは

$$j = 0,\ 1/2,\ 1,\ 3/2,\ \cdots \tag{2.21}$$

の0または正の整数および半整数であることになる．このとき，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の固有値は

$$\lambda = j(j+1) \tag{2.22}$$

で与えられる．例えば

$j=0$ のとき，　$m=0,\quad \lambda=0,$

$j=1/2$ のとき，$m=+1/2,-1/2,\quad \lambda=(1/2)(1/2+1)=3/4,$

$j=1$ のとき，　$m=1,\ 0,\ -1,\quad \lambda=1(1+1)=2.$

最後に，(2.17)の未定の定数 $a_m^{(\pm)}$ を決定しておこう．(2.17)の第2式に左から $\langle m-1|$ を掛けると，$\langle m-1|\hat{J}^{(-)}|m\rangle = a_m^{(-)}\langle m-1|m-1\rangle = a_m^{(-)}$．一方，$\langle m-1|\hat{J}^{(-)}|m\rangle = \{\hat{J}^{(+)}|m-1\rangle\}^{\dagger}|m\rangle = a_{m-1}^{(+)*}\langle m|m\rangle = a_{m-1}^{(+)*}$ である．したがって，次の関係が成立する．

$$a_m^{(-)} = a_{m-1}^{(+)*}. \tag{2.23}$$

また，$(\hat{J}^{(+)}|m\rangle)^{\dagger}\cdot(\hat{J}^{(+)}|m\rangle) = |a_m^{(+)}|^2\langle m+1|m+1\rangle = |a_m^{(+)}|^2$．一方，$(\hat{J}^{(+)}|m\rangle)^{\dagger}\cdot(\hat{J}^{(+)}|m\rangle) = \langle m|\hat{J}^{(-)}\hat{J}^{(+)}|m\rangle = \langle m|(\hat{\boldsymbol{J}}^2-\hat{J}_z{}^2-\hat{J}_z)|m\rangle = j(j+1)-m(m+1) = (j-m)(j+m+1)$ である．したがって

$$a_m^{(+)} = \mathrm{e}^{i\delta}\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \tag{2.24}$$

となる．また(2.23)の関係より

$$a_m^{(-)} = a_{m-1}^{(+)*} = \mathrm{e}^{-i\delta}\sqrt{(j+m)(j-m+1)} \tag{2.25}$$

をえる．ここで不定の位相 δ を0と選び，また j の値を決めたときの状態ベクトル $|m\rangle$ を $|j,m\rangle$ と書きかえると

$$\begin{aligned}\hat{J}^{(+)}|j,m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,|j,m+1\rangle,\\ \hat{J}^{(-)}|j,m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|j,m-1\rangle\end{aligned} \tag{2.26}$$

と表わされる．

これまでの議論は，交換関係(2.9)だけで定義される広義の角運動量に関するものであった．これに対して，正準変数 $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{p}$ を用いて(1.13)で与えられる軌動角運動量の場合には，j のとる値は0または正の整数に限られ，半整数は許されない．これに伴って，m のとる値もまた，(2.8)のように0または正

負の整数だけであることを示そう．軌道角運動量の場合には，$\boldsymbol{L}$ の各成分は極座標系で(1.30)のように表わすことができる．したがってこの場合の $\hat{J}^{(+)}$ と $\hat{J}^{(-)}$ は，それぞれ

$$
\begin{aligned}
M^{(+)} &= M_x+iM_y = \mathrm{e}^{i\varphi}\left[+\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \\
M^{(-)} &= M_x-iM_y = \mathrm{e}^{-i\varphi}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta}+i\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]
\end{aligned}
\tag{2.27}
$$

と表わされる．ここで $\xi=\cos\theta$ ($\pi\geqq\theta\geqq 0$) とおくと，$\sin\theta=\sqrt{1-\xi^2}$ である．この変数を用いると，(2.27)と $\boldsymbol{M}^2$ は

$$
\begin{aligned}
M^{(+)} &= \mathrm{e}^{i\varphi}\left[-\sqrt{1-\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}-\frac{\xi}{\sqrt{1-\xi^2}}\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \\
M^{(-)} &= \mathrm{e}^{-i\varphi}\left[+\sqrt{1-\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}-\frac{\xi}{\sqrt{1-\xi^2}}\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right], \\
\boldsymbol{M}^2 &= -\frac{\partial}{\partial\xi}\left[(1-\xi^2)\frac{\partial}{\partial\xi}\right]-\frac{1}{1-\xi^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}.
\end{aligned}
\tag{2.28}
$$

ここで，(1.33)の $\boldsymbol{M}^2$ と M_z の同時固有関数を $Y_m(\xi,\varphi)$ と書いたとき，(2.7)により，それが $\mathrm{e}^{im\varphi}$ に比例することに注意すると

$$
\begin{aligned}
M^{(+)}Y_m &= \mathrm{e}^{i\varphi}\left[-\sqrt{1-\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}-\frac{m\xi}{\sqrt{1-\xi^2}}\right]Y_m \\
&= -\mathrm{e}^{i\varphi}(\sqrt{1-\xi^2})^{m+1}\frac{\partial}{\partial\xi}\{(\sqrt{1-\xi^2})^{-m}Y_m\}
\end{aligned}
\tag{2.29}
$$

と表わすことができる．ここで2番目の等号は，最後の表式の ξ についての微分を実行してみれば容易に確かめられる．同様にして

$$
\begin{aligned}
M^{(-)}Y_m &= \mathrm{e}^{-i\varphi}\left[+\sqrt{1-\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}-\frac{m\xi}{\sqrt{1-\xi^2}}\right]Y_m \\
&= +\mathrm{e}^{-i\varphi}(\sqrt{1-\xi^2})^{-m+1}\frac{\partial}{\partial\xi}\{(\sqrt{1-\xi^2})^{m}Y_m\}.
\end{aligned}
\tag{2.30}
$$

ここで習慣にしたがって，軌道角運動量の z 成分の固有値 m の最大値を l と書くと，(2.29)と(2.19)の第1式により

$$
M^{(+)}Y_l = -\mathrm{e}^{i\varphi}(\sqrt{1-\xi^2})^{l+1}\frac{\partial}{\partial\xi}\{(\sqrt{1-\xi^2})^{-l}Y_l\} = 0
$$

である．これより

$$(\sqrt{1-\xi^2})^{-l}\, Y_l = c. \qquad (2.31)$$

ここで c は変数 ξ に関する定数である．一方，正の整数 n に対して，

$$(M^{(-)})^n Y_m = \mathrm{e}^{-in\varphi}(\sqrt{1-\xi^2})^{-m+n}\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\{(\sqrt{1-\xi^2})^m Y_m\} \qquad (2.32)$$

が成立することに注意する．$n=1$ のとき，(2.32)は(2.30)に一致する．したがって，(2.32)は数学的帰納法を用いて証明することができる(問 23 参照)．(2.32)で m の最大値 $m=l$ をとり，また $n=2l+1$ とおくと，(2.32)の左辺は $(M^{(-)})^{2l+1}Y_l$ となるが，Y_l に $M^{(-)}$ を $(2l+1)$ 回掛けると，それは(2.19)の第 2 式により 0 となる．すなわち

$$(M^{(-)})^{2l+1}\, Y_l = \mathrm{e}^{-i(2l+1)\varphi}(\sqrt{1-\xi^2})^{l+1}\frac{\partial^{2l+1}}{\partial\xi^{2l+1}}\{(\sqrt{1-\xi^2})^l\, Y_l\} = 0$$

である．これより

$$\partial^{2l+1}\{(\sqrt{1-\xi^2})^l\, Y_l\}/\partial\xi^{2l+1} = 0.$$

これを積分すると

$$(\sqrt{1-\xi^2})^l\, Y_l = (\xi \text{ の } 2l \text{ 次の多項式}) \qquad (2.33)$$

をえる．(2.33)を(2.31)で割ると

$$(1-\xi^2)^l = (\xi \text{ の } 2l \text{ 次の多項式}) \qquad (2.34)$$

が成立しなければならない．したがって，左辺が ξ の $2l$ 次の多項式であるためには，l は 0 または正の整数であることが要求される．すなわち，$\boldsymbol{M}^2$ の固有値 $\lambda=l(l+1)$ において，l のとりえる値は

$$l = 0,\ 1,\ 2,\ \cdots \qquad (2.35)$$

の 0 または正の整数に限られ，一般の角運動量のように半整数の値をとることは許されない．その特定の l の値に対して，m のとる値は(2.20)より

$$m = l,\ l-1,\ l-2,\ \cdots,\ -l+1,\ -l \qquad (2.36)$$

の $(2l+1)$ 個であるということになる．

以上の結果から，(1.33)は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{M}^2\, Y_m(\theta,\varphi) &= -\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left\{(1-\xi^2)\frac{\partial}{\partial\xi}\right\}+\frac{1}{1-\xi^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]Y_m(\theta,\varphi)\\ &= l(l+1)\,Y_m(\theta,\varphi)\end{aligned}$$

と表わされる．そこで $Y_m(\theta,\varphi)=F_m(\xi)e^{im\varphi}$ と書くと，$F_m(\xi)$ に関する微分方程式

$$\frac{d}{d\xi}\left[(1-\xi^2)\frac{dF_m(\xi)}{d\xi}\right]-\frac{m^2}{1-\xi^2}F_m(\xi)+l(l+1)F_m(\xi)=0 \qquad (2.37)$$

がえられる．これは(2.6)の方程式と同じもので，これを **Legendre の陪微分方程式**という．$F_m(\xi)$ を求めるにはこれを解けばよいが，ここでは下降演算子 $M^{(-)}$ を利用することにより解を求めよう．(2.31)より，m がその最大値 l をとるとき，

$$Y_l(\theta,\varphi)=a_l(\sqrt{1-\xi^2})^l e^{il\varphi}=a_l\sin^l\theta\, e^{il\varphi}$$

である．そこでこれからは，$Y_l(\xi,\varphi)\equiv Y_{l,l}(\theta,\varphi)$ などと書くことにする．ここで積分定数 a_l は規格化条件

$$\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi}\sin\theta d\theta|Y_{l,l}(\theta,\varphi)|^2=|a_l|^2\cdot 2\pi\int_{-1}^{1}(1-\xi^2)^l d\xi=1$$

から決まる．最後の積分は，部分積分を繰りかえして

$$\int_{-1}^{1}(1-\xi^2)^l d\xi=\int_{-1}^{1}(1-\xi)^l(1+\xi)^l d\xi=-\frac{1}{l+1}\int_{-1}^{1}\frac{d}{d\xi}(1-\xi)^l\cdot(1+\xi)^{l+1}d\xi$$
$$=\frac{l}{l+1}\int_{-1}^{1}(1-\xi)^{l-1}\cdot(1+\xi)^{l+1}d\xi=\cdots\cdots$$
$$=\frac{(l!)^2}{(2l)!}\int_{-1}^{1}(1+\xi)^{2l}d\xi=\frac{(l!)^2\cdot 2^{2l+1}}{(2l+1)!}$$

と計算される．これより

$$a_l=[(-1)^l/2^l l!]\sqrt{(2l+1)!/4\pi}.$$

ここで $(-1)^l$ の因子をつけたのは便宜上のものである．こうして

$$Y_{l,l}(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}}\sin^l\theta\, e^{il\varphi} \qquad (2.38)$$

がえられる．次に(2.26)の一般式を軌道角運動量の場合に適用すると，

$$Y_{l,m-1}(\theta,\varphi)=\frac{1}{\sqrt{(l+m)(l-m+1)}}M^{(-)}Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

となる．この操作を，(2.38)から出発して繰りかえし適用すると

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi)=\sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!(2l)!}}(M^{(-)})^{l-m}Y_{l,l}(\theta,\varphi) \qquad (2.39)$$

をえる．一方，(2.32)で $m=l$，$n=l-m$ とおくと

$$(M^{(-)})^{l-m}Y_{l,l}(\theta,\varphi)$$
$$=(+1)^l\mathrm{e}^{-i(l-m)\varphi}(\sqrt{1-\xi^2})^{-m}\frac{\partial^{l-m}}{\partial\xi^{l-m}}\{(\sqrt{1-\xi^2})^lY_{l,l}(\theta,\varphi)\}$$

となる．この右辺の $Y_{l,l}$ に(2.38)を代入し，さらにその結果を(2.39)の右辺に代入すると

$$Y_{l,m}(\theta,\varphi)=\frac{(-1)^l}{2^l l!}\sqrt{\frac{(l+m)!(2l+1)}{4\pi(l-m)!}}\frac{\mathrm{e}^{im\varphi}}{(\sqrt{1-\xi^2})^m}\frac{\mathrm{d}^{l-m}}{\mathrm{d}\xi^{l-m}}(1-\xi^2)^l \quad (2.40)$$

がえられる．これが $\boldsymbol{M}^2$，M_z の，固有値 l と m に属する規格化された同時固有関数である．これを**球面調和関数**といい，また，(2.40)の $\mathrm{e}^{im\varphi}$ を除いたものを **Legendre の陪関数**という．(2.40)の $\mathrm{e}^{im\varphi}$ の因子の存在から，$m'\neq m$ のとき $Y_{l,m}$ と $Y_{l,m'}$ が直交し，$l'\neq l$ のときには演算子 $\boldsymbol{M}^2$ のエルミート性により，第2章(1.17)の議論によって，$Y_{l,m}$ と $Y_{l',m}$ が直交することが示される．

ここで，(2.40)の固有関数を $l=0,1,2$ の場合に具体的に書き出しておこう．まず $l=0$ のとき

$$Y_{0,0}=1/\sqrt{4\pi} \quad (2.41)$$

は，この節の最初に述べた球対称な状態で，この状態関数は，$\boldsymbol{M}^2$ と M_z の同時固有関数であるとともに，例外的に M_x と M_y の固有状態にもなっている．次に $l=1$ のときには，$m=0,\pm1$ の3個の状態があり，それらは

$$Y_{1,0}(\theta,\varphi)=\sqrt{3/4\pi}\cos\theta,\qquad Y_{1,\pm1}(\theta,\varphi)=\mp\sqrt{3/8\pi}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm i\varphi} \quad (2.42)$$

である．あるいはこれらを，カーテシアン座標 (x,y,z) を用いて表わすと

$$Y_{1,0}=\sqrt{3/4\pi}\cdot z/r,\qquad Y_{1,\pm1}=\mp\sqrt{3/8\pi}(x\pm iy)/r \quad (2.43)$$

となる．そこで(2.43)から

$$\begin{aligned}P_x&=(1/\sqrt{2})[Y_{1,-1}-Y_{1,1}]=\sqrt{3/4\pi}x/r,\\P_y&=(i/\sqrt{2})[Y_{1,-1}+Y_{1,1}]=\sqrt{3/4\pi}y/r,\\P_z&=Y_{1,0}=\sqrt{3/4\pi}z/r\end{aligned} \quad (2.44)$$

をつくると，これらは3次元空間のベクトル $\boldsymbol{P}$ の3成分とみなすことができる．(2.42)の固有状態の確率分布は

$$|Y_{1,0}(\theta,\varphi)|^2=(3/4\pi)\cos^2\theta,\qquad |Y_{1,\pm1}(\theta,\varphi)|^2=(3/8\pi)\sin^2\theta$$

で与えられる．これらの分布は，角運動量の x 成分と y 成分の不確定性を反映

して，いずれも z 軸を中心軸とする回転に対して対称的になっている．このように z 軸が特別な方向になっていることを**方向量子化**という．また，量子数 l を**方位量子数**，m を**磁気量子数**という．z 軸のとり方は勝手なのに，その方向が特別な役割をもつのは不思議に思えるが，いまの場合に $\boldsymbol{M}^2$ と z 軸方向の角運動量の成分 M_z の同時固有関数をとっているのであるから，実は当然のことである．事実，図3.1の極座標系をそのまま利用しながら，$\boldsymbol{M}^2$ と M_x あるいは M_y の同時固有関数をつくることも可能である(問25参照)．$l=2$ のときは，

$$Y_{2,0} = \sqrt{5/16\pi}(3\cos^2\theta-1), \qquad Y_{2,\pm1} = \mp\sqrt{15/8\pi}\cos\theta\cdot\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm i\varphi},$$
$$Y_{2,\pm2} = \sqrt{15/32\pi}\sin^2\theta\,\mathrm{e}^{\pm2i\varphi} \tag{2.45}$$

である．

さて，(1.30)の L_z の表示を用いると，交換関係

$$[\varphi, L_z] = [\varphi, (\hbar/i)\partial/\partial\varphi] = i\hbar$$

をえる．これより，不確定性関係 $\Delta L_z\cdot\Delta\varphi \geqq \hbar/2$ が成立するように思える．そこでいま，L_z の固有状態を考えると，このとき L_z のとる値は確定していて，$\Delta L_z=0$ である．すると不確定性関係は $\Delta\varphi\to\infty$ を要求することになる．ところが，φ の不確定性 $\Delta\varphi$ の最大値は 2π にすぎない．この矛盾の原因は，演算子 L_z がエルミートであるために要求される状態関数 $\boldsymbol{\Phi}(\varphi)$ に対する制限を，状態関数 $\varphi\boldsymbol{\Phi}(\varphi)$ が破ってしまうことにある．L_z がエルミート演算子であるためには，任意関数 $\boldsymbol{\Phi}_1(\varphi)$ と $\boldsymbol{\Phi}_2(\varphi)$ に対して

$$\int_0^{2\pi}\boldsymbol{\Phi}_1^*(\varphi)\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\boldsymbol{\Phi}_2(\varphi)\right]\mathrm{d}\varphi = \int_0^{2\pi}\left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\boldsymbol{\Phi}_1(\varphi)}{\partial\varphi}\right]^*\boldsymbol{\Phi}_2(\varphi)\mathrm{d}\varphi$$

でなければならない．この右辺を部分積分すると

$$-\frac{\hbar}{i}[\boldsymbol{\Phi}_1^*(2\pi)\boldsymbol{\Phi}_2(2\pi)-\boldsymbol{\Phi}_1^*(0)\boldsymbol{\Phi}_2(0)]+\int_0^{2\pi}\boldsymbol{\Phi}_1^*(\varphi)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\boldsymbol{\Phi}_2(\varphi)}{\partial\varphi}\mathrm{d}\varphi$$

である．したがって L_z がエルミートであるためには，この第1項が0であることが要求される．$\boldsymbol{\Phi}_1=$一定値をも任意関数に含めておけば，$\boldsymbol{\Phi}_2(2\pi)=\boldsymbol{\Phi}_2(0)$ でなければならない．すなわち，L_z の作用する状態関数はつねに周期性の条件 $\boldsymbol{\Phi}(\varphi+2\pi)=\boldsymbol{\Phi}(\varphi)$ をみたしている必要がある．ところが，この状態に φ を作用させてえられる状態関数 $\varphi\boldsymbol{\Phi}(\varphi)$ は周期性条件をみたしていない．したがって，状態 $\varphi\boldsymbol{\Phi}(\varphi)$ に対して L_z はエルミートではない．こうして，不確定性関

係の成立する前提条件が崩れてしまい，$\Delta L_z \cdot \Delta\varphi \geqq \hbar/2$ の関係は成立しないのである．

問 23 (2.32)の表式を数学的帰納法を利用して証明せよ．

問 24 空間座標の反転 $\boldsymbol{r}'=-\boldsymbol{r}$ を考えたとき，(2.40)の $\boldsymbol{M}^2$ と M_z の同時固有関数のパリティーが $(-1)^l$ であることを示せ．

問 25 (1.21)の座標変換式と(2.44)を用いて

$$\mathscr{X}_{1,0} = \sqrt{3/4\pi}\, x/r = \sqrt{3/4\pi}\sin\theta\cdot\cos\varphi,$$
$$\mathscr{X}_{1,\pm1} = \mp\sqrt{3/8\pi}(y\pm iz)/r = \mp\sqrt{3/8\pi}(\sin\theta\cdot\sin\varphi\pm i\cos\theta),$$

および

$$\mathscr{Y}_{1,0} = \sqrt{3/4\pi}\, y/r = \sqrt{3/4\pi}\sin\theta\cdot\sin\varphi,$$
$$\mathscr{Y}_{1,\pm1} = \mp\sqrt{3/8\pi}(z\pm ix)/r = \mp\sqrt{3/8\pi}(\cos\theta\pm i\sin\theta\cdot\cos\varphi)$$

をつくると，これらはそれぞれ，M_x および M_y の固有値 0, ±1 に属する固有関数になっていることを示せ．

§3 3次元の井戸型ポテンシャルによる束縛状態

質量 m の粒子が，半径 a の井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0\,(V_0>0), & r<a \\ 0, & r\geqq a \end{cases} \tag{3.1}$$

の作用のもとにあるときの束縛状態を考えよう．この系の固有値方程式は

$$[-(\hbar^2/2m)\triangle + V(r)]\psi = E\psi \tag{3.2}$$

で与えられる．ここで $E<0$ であるとする．変数分離法により

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R_l(r)\,Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

とおくと，動径関数 $R_l(r)$ のみたす方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\mathrm{d}^2R_l}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r}\right]+\left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2}+V(r)\right)R_l = -|E|R_l \tag{3.3}$$

である．ここで $\alpha=\sqrt{2m(V_0-|E|)/\hbar^2}$ とおき，また $\rho=\alpha r$ とすると，$r<a$ のポテンシャルの内部での方程式は次のように表わされる．

$$\frac{\mathrm{d}^2R_l(\rho)}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\mathrm{d}R_l(\rho)}{\mathrm{d}\rho}+\left[1-\frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]R_l(\rho) = 0. \tag{3.4}$$

$l\neq 0$ で遠心力ポテンシャルによる項があるときは，(1.35)の $u(r)=rR(r)$ を用いた方程式よりも，(3.4)をそのまま考えたほうがよい．それは

$$R_l(\rho) = f_l(\rho)/\sqrt{\rho} \tag{3.5}$$

とおき，これを(3.4)に代入すると

$$\frac{\mathrm{d}^2 f_l(\rho)}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}f_l(\rho)}{\mathrm{d}\rho} + \left[1 - \frac{(l+1/2)^2}{\rho^2}\right] f_l(\rho) = 0 \tag{3.6}$$

となって，これは**Besselの微分方程式**

$$\frac{\mathrm{d}^2 B_l(\rho)}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}B_l(\rho)}{\mathrm{d}\rho} + \left(1 - \frac{l^2}{\rho^2}\right) B_l(\rho) = 0 \tag{3.7}$$

で，l を $(l+1/2)$ としたものだからである．(3.7)の2階の微分方程式の2個の独立解は，Bessel関数

$$J_l(\rho) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{m!(l+m)!}\left(\frac{\rho}{2}\right)^{l+2m} \tag{3.8}$$

およびNeumann関数

$$N_l(\rho) = \frac{J_l(\rho)\cos \pi l - J_{-l}(\rho)}{\sin \pi l} \tag{3.9}$$

で与えられる．したがって，(3.6)の解は $J_{l+1/2}(\rho)$，$N_{l+1/2}(\rho)$ である．そこで(3.5)の関係を考慮して，**球Bessel関数**と**球Neumann関数**を，それぞれ

$$j_l(\rho) = \sqrt{\pi/2\rho}\cdot J_{l+1/2}(\rho), \qquad n_l(\rho) = \sqrt{\pi/2\rho}\cdot N_{l+1/2}(\rho) \tag{3.10}$$

で定義する．(3.8)と(3.9)を(3.10)の右辺に代入して，l の小さい値に対して，(3.10)の関数を書き出すと

$$\begin{aligned}
j_0(\rho) &= \frac{\sin\rho}{\rho}, \qquad j_1(\rho) = \frac{\sin\rho}{\rho^2} - \frac{\cos\rho}{\rho}, \\
j_2(\rho) &= \left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\sin\rho - \frac{3\cos\rho}{\rho^2}, \\
n_0(\rho) &= -\frac{\cos\rho}{\rho}, \qquad n_1(\rho) = -\frac{\cos\rho}{\rho^2} - \frac{\sin\rho}{\rho}, \\
n_2(\rho) &= -\left(\frac{3}{\rho^3} - \frac{1}{\rho}\right)\cos\rho - \frac{3\sin\rho}{\rho^2}
\end{aligned} \tag{3.11}$$

であり，これらの関数は ρ^{-1} のベキと三角関数で表わされる．一般には

$$j_l(\rho) = (-\rho)^l\left(\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\right)^l\left(\frac{\sin\rho}{\rho}\right), \qquad n_l(\rho) = -(-\rho)^l\left(\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\right)^l\left(\frac{\cos\rho}{\rho}\right) \tag{3.12}$$

であり，これらの関数は原点の近傍では

$$
\begin{aligned}
j_l(\rho) &\xrightarrow[\rho\to 0]{} \frac{\rho^l}{(2l+1)!!}\left(1-\frac{\rho^2}{2(2l+3)}+\cdots\right), \\
n_l(\rho) &\xrightarrow[\rho\to 0]{} -\frac{(2l-1)!!}{\rho^{l+1}}
\end{aligned}
\tag{3.13}
$$

である．すなわち，$j_l(\rho)$ は原点で収束するが，$n_l(\rho)$ はそこで発散する．なお(3.13)で

$$
\begin{aligned}
(2l+1)!! &\equiv (2l+1)(2l-1)(2l-3)\cdots 5\cdot 3\cdot 1, \\
(2l-1)!! &\equiv (2l-1)(2l-3)\cdots 5\cdot 3\cdot 1
\end{aligned}
$$

である．$\rho\to\infty$ では

$$
j_l(\rho) \xrightarrow[\rho\to\infty]{} \frac{1}{\rho}\sin(\rho-l\pi/2), \qquad n_l(\rho) \xrightarrow[\rho\to\infty]{} -\frac{1}{\rho}\cos(\rho-l\pi/2). \tag{3.14}
$$

こうして，(3.4)の方程式の一般解は，$R_l(\rho)=Aj_l(\rho)+Bn_l(\rho)$ で与えられる．ここで A と B は積分定数である．しかし，(1.37)より $u_l(0)=0$ が要求されるので，$R_l(\rho)=u_l(\rho)/\rho$ は原点で有界でなくてはならない．したがって，$B=0$ と選ぶ．こうして，ポテンシャル内部の解は

$$
R_l(\rho) = Aj_l(\rho) \tag{3.15}
$$

で与えられる．

領域 $r>a$ では $V(r)=0$ で，このとき(3.3)は

$$
\frac{\mathrm{d}^2R_l}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r}-\left[\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2m}{\hbar^2}|E|\right]R_l = 0 \tag{3.16}
$$

となる．ここで $\beta=\sqrt{2m|E|/\hbar^2}$，$\rho'=i\beta r$ とおくと，

$$
\frac{\mathrm{d}^2R_l}{\mathrm{d}\rho'^2}+\frac{2}{\rho'}\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}\rho'}+\left(1-\frac{l(l+1)}{\rho'^2}\right)R_l = 0 \tag{3.17}
$$

である．ここで第1種および第2種の**球 Hankel 関数**を

$$
h_l^{(1)}(\rho) = j_l(\rho)+i\,n_l(\rho), \qquad h_l^{(2)}(\rho) = j_l(\rho)-i\,n_l(\rho) \tag{3.18}
$$

で定義する．(3.14)の漸近形を用いると

$$
h_l^{(1)}(\rho) \xrightarrow[\rho\to\infty]{} \frac{1}{\rho}\mathrm{e}^{i[\rho-(l+1)\pi/2]}, \qquad h_l^{(2)}(\rho) \xrightarrow[\rho\to\infty]{} \frac{1}{\rho}\mathrm{e}^{-i[\rho-(l+1)\pi/2]}
$$

である．ここで $\rho=i\beta r$ とすると，$h_l^{(2)}\sim\mathrm{e}^{\beta r}$ となり，これは $r\to\infty$ で発散する．

そこで $h_l^{(1)}$ だけを残すと，ポテンシャルの外の解は

$$R_l(\rho') = Ch_l^{(1)}(i\beta r) \tag{3.19}$$

で与えられる．C は定数である．(3.19)の右辺の $h_l^{(1)}(i\beta r)$ の l の小さいものを書き出すと，

$$\begin{aligned} h_0^{(1)}(i\beta r) &= -\frac{1}{\beta r}\mathrm{e}^{-\beta r}, \qquad h_1^{(1)}(i\beta r) = i\left(\frac{1}{\beta r}+\frac{1}{\beta^2 r^2}\right)\mathrm{e}^{-\beta r}, \\ h_2^{(1)}(i\beta r) &= \left(\frac{1}{\beta r}+\frac{3}{\beta^2 r^2}+\frac{3}{\beta^3 r^3}\right)\mathrm{e}^{-\beta r}. \end{aligned} \tag{3.20}$$

第1章§4(2)で述べたように，ポテンシャルの不連続点 $r=a$ で，$u_l(r)$ と $\mathrm{d}u_l/\mathrm{d}r$ は連続である．したがって，対数微分 $(\mathrm{d}u_l/\mathrm{d}r)/u_l$ が $r=a$ で連続であり，また $(\mathrm{d}R_l/\mathrm{d}r)/R_l$ も連続でなければならない．すなわち，

$$\left.\frac{\mathrm{d}j_l(\alpha r)}{\mathrm{d}r}\middle/ j_l(\alpha r)\right|_{r=a} = \left.\frac{\mathrm{d}h_l^{(1)}(i\beta r)}{\mathrm{d}r}\middle/ h_l^{(1)}(i\beta r)\right|_{r=a} \tag{3.21}$$

である．この条件から，束縛状態のエネルギー固有値が決まる．

ここで $\xi=\alpha a$, $\eta=\beta a$ とおくと，

$$\xi^2+\eta^2 = 2mV_0a^2/\hbar^2 \tag{3.22}$$

であり，$l=0$ の場合には(3.21)は

$$\xi\cot\xi = -\eta \tag{3.23}$$

となる．(3.22)と(3.23)から，グラフを用いてエネルギー固有値を求めることができる．$l=1$ のときには(3.11)と(3.21)より

$$\cot\xi/\xi-1/\xi^2 = 1/\eta+1/\eta^2 \tag{3.24}$$

がえられる．

問26　井戸型ポテンシャル(3.1)で，$l>0$ の固有状態がぎりぎり束縛状態になるとき，V_0a^2 の値は $\hbar^2z^2/2m$ で与えられることを示せ．ここで z は，$j_{l-1}(z)=0$ の0以外の根である．

§4　水素型原子の束縛状態

水素型原子とは，質量 m，電荷 $e(<0)$ の1個の電子が，質量 M，電荷 $Z|e|$ の原子核に，Coulomb ポテンシャル $V(r)=-Ze^2/4\pi\varepsilon_0 r$ の作用によって束縛状態をつくっている系である．Z は核内の陽子の数である．この系の動径関数

$R_l(r)$ のみたす方程式は，(3.3)により

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r}\right)+\left[\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r}\right]R_l = ER_l \tag{4.1}$$

で与えられる．ここで $\mu=mM/(M+m)\cong m$ は換算質量であり，l は角運動量の方位量子数である．(4.1)の式を簡潔にするため，$\varepsilon=(2m/\hbar^2)(a_0/Z)^2E$，$\rho=(Z/a_0)r$ とおく．ここで a_0 は Bohr 半径である．また，$u_l(\rho)=\rho R_l$ とすると，(4.1)は

$$-\frac{\mathrm{d}^2u_l(\rho)}{\mathrm{d}\rho^2}+\left[\frac{l(l+1)}{\rho^2}-\frac{2}{\rho}\right]u_l(\rho) = \varepsilon u_l(\rho) \tag{4.2}$$

となる．通常はこの方程式を解くのに級数展開法を用いるが，ここでは調和振動子や角運動量の固有値問題で用いた昇降演算子による方法をとることにする．

まず，演算子 b_{l+1} と $b_{l+1}{}^\dagger$ を次のように定義する．

$$b_{l+1}\equiv\frac{1}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+i\left(\frac{l+1}{\rho}-\frac{1}{l+1}\right),\qquad b_{l+1}{}^\dagger\equiv\frac{1}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-i\left(\frac{l+1}{\rho}-\frac{1}{l+1}\right). \tag{4.3}$$

すると

$$\begin{aligned} b_{l+1}{}^\dagger b_{l+1} &= -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{l(l+1)}{\rho^2}-\frac{2}{\rho}+\frac{1}{(l+1)^2}, \\ b_{l+1}b_{l+1}{}^\dagger &= -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{(l+1)(l+2)}{\rho^2}-\frac{2}{\rho}+\frac{1}{(l+1)^2} \end{aligned} \tag{4.4}$$

である．このとき，(4.2)の左辺の演算子 $H^{(1)}$ は

$$H^{(1)} = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{l(l+1)}{\rho^2}-\frac{2}{\rho} = b_{l+1}{}^\dagger b_{l+1}+\varepsilon^{(l+1)} \tag{4.5}$$

と表わされる．ここで

$$\varepsilon^{(l+1)} = -1/(l+1)^2$$

である．次に演算子 $H^{(2)}$ を

$$H^{(2)} \equiv b_{l+1}b_{l+1}{}^\dagger+\varepsilon^{(l+1)} \tag{4.6}$$

で定義する．ここで(4.4)の第2式を利用すると，(4.6)は

$$H^{(2)} = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{(l+1)(l+2)}{\rho^2}-\frac{2}{\rho}$$

である．そこで(4.3)にならって，演算子 b_{l+2} と $b_{l+2}{}^\dagger$ を

$$b_{l+2}=\frac{1}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+i\left(\frac{l+2}{\rho}-\frac{1}{l+2}\right),\qquad b_{l+2}{}^{\dagger}=\frac{1}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-i\left(\frac{l+2}{\rho}-\frac{1}{l+2}\right)$$

で定義する．すると

$$b_{l+2}{}^{\dagger}b_{l+2}=\left[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{(l+1)(l+2)}{\rho^2}-\frac{2}{\rho}\right]+\frac{1}{(l+2)^2}$$

となる．したがって，(4.6)の $H^{(2)}$ は

$$H^{(2)}=b_{l+2}{}^{\dagger}b_{l+2}+\varepsilon^{(l+2)},\qquad \varepsilon^{(l+2)}=-1/(l+2)^2$$

と表わされる．このような手続きを繰りかえすと，

$$H^{(k)}=b_{l+k-1}b_{l+k-1}{}^{\dagger}+\varepsilon^{(l+k-1)}=b_{l+k}{}^{\dagger}b_{l+k}+\varepsilon^{(l+k)} \tag{4.7}$$

がえられる．ここで，一般に $k\geqq 1$ に対して

$$b_{l+k}=\frac{1}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+i\left(\frac{l+k}{\rho}-\frac{1}{l+k}\right),\qquad b_{l+k}{}^{\dagger}=\frac{1}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-i\left(\frac{l+k}{\rho}-\frac{1}{l+k}\right), \tag{4.8}$$

また $\varepsilon^{(l+k)}=-1/(l+k)^2$ と定義している．

そこでいま，ある関数 $\phi^{(l+k-1)}$ を

$$b_{l+k}\phi^{(l+k-1)}=0 \tag{4.9}$$

の解として定義する．するとこの $\phi^{(l+k-1)}$ は，演算子 $H^{(k)}$ の最低の固有値に属する固有状態であり，その固有値は $\varepsilon^{(l+k)}$ で与えられる．なぜなら，(4.7)と(4.9)より

$$H^{(k)}\phi^{(l+k-1)}=(b_{l+k}{}^{\dagger}b_{l+k}+\varepsilon^{(l+k)})\phi^{(l+k-1)}=\varepsilon^{(l+k)}\phi^{(l+k-1)} \tag{4.10}$$

であり，また $H^{(k)}$ の $\phi^{(l+k-1)}$ 以外の，規格化された固有関数を $\chi^{(l+k-1)}$ と書くと

$$\int_0^\infty \chi^{*(l+k-1)}H^{(k)}\chi^{(l+k-1)}\mathrm{d}\rho=\int_0^\infty |b_{l+k}\chi^{(l+k-1)}|^2\mathrm{d}\rho+\varepsilon^{(k+l)}>\varepsilon^{(k+l)}$$

となるからである．ここで1次元系の束縛状態には縮退がなく，したがって $\phi^{(l+k-1)}$ 以外の固有関数に対しては $b_{l+k}\chi^{(l+k-1)}\neq 0$ であるため，右辺の第1項は0でない正値をとることを利用している．

次に(4.7)より

$$\begin{aligned}H^{(k)}b_{l+k}{}^{\dagger}&=(b_{l+k}{}^{\dagger}b_{l+k}+\varepsilon^{(l+k)})b_{l+k}{}^{\dagger}\\&=b_{l+k}{}^{\dagger}(b_{l+k}b_{l+k}{}^{\dagger}+\varepsilon^{(l+k)})=b_{l+k}{}^{\dagger}H^{(k+1)}\end{aligned} \tag{4.11}$$

である．この関係は重要である．同様にして，$b_{l+k}H^{(k)}=H^{(k+1)}b_{l+k}$ の関係が

成立する．

さて，(4.10)から $u_{l+1}\equiv\phi^{(l)}$ は $H^{(1)}$ の固有値 $\varepsilon^{(l+1)}$ に属する固有関数であることが分かる．なぜなら

$$H^{(1)}u_{l+1} = H^{(1)}\phi^{(l)} = \varepsilon^{(l+1)}\phi^{(l)} = \varepsilon^{(l+1)}u_{l+1}$$

となるからである．また，$u_{l+2}\equiv b_{l+1}{}^{\dagger}\phi^{(l+1)}$ は，(4.11)と(4.10)より，

$$\begin{aligned} H^{(1)}u_{l+2} &= H^{(1)}b_{l+1}{}^{\dagger}\phi^{(l+1)} = b_{l+1}{}^{\dagger}H^{(2)}\phi^{(l+1)} \\ &= \varepsilon^{(l+2)}b_{l+1}{}^{\dagger}\phi^{(l+1)} = \varepsilon^{(l+2)}u_{l+2} \end{aligned}$$

となるから，u_{l+2} は $H^{(1)}$ の固有値 $\varepsilon^{(l+2)}$ に属する固有関数である．そこで一般に

$$u_{l+k} \equiv b_{l+1}{}^{\dagger}b_{l+2}{}^{\dagger}\cdots b_{l+k-1}{}^{\dagger}\phi^{(l+k-1)} \tag{4.12}$$

で u_{l+k} を定義すると，これは $H^{(1)}$ の固有値 $\varepsilon^{(l+k)}$ に属する固有関数であることが次のようにして示される．

$$\begin{aligned} H^{(1)}u_{l+k} &= H^{(1)}b_{l+1}{}^{\dagger}b_{l+2}{}^{\dagger}\cdots b_{l+k-1}{}^{\dagger}\phi^{(l+k-1)} \\ &= b_{l+1}{}^{\dagger}H^{(2)}b_{l+2}{}^{\dagger}\cdots b_{l+k-1}{}^{\dagger}\phi^{(l+k-1)} \\ &= b_{l+1}{}^{\dagger}b_{l+2}{}^{\dagger}\cdots b_{l+k-1}{}^{\dagger}H^{(k)}\phi^{(l+k-1)} \\ &= \varepsilon^{(l+k)}b_{l+1}{}^{\dagger}b_{l+2}{}^{\dagger}\cdots b_{l+k-1}{}^{\dagger}\phi^{(l+k-1)} = \varepsilon^{(l+k)}u_{l+k}. \end{aligned}$$

以上の結果をまとめると，$H^{(1)}$ の固有関数は(4.12)で与えられ，その固有値は $\varepsilon^{(l+k)}=-1/(l+k)^2$ である．なお，(4.12)の右側の $\phi^{(l+k-1)}$ は(4.9)の解として決まる．

そこで，$n=l+k$ とおくと，$l=0,1,2,\cdots$ で $k=1,2,3,\cdots$ であるから，n のとる値は $1,2,3,\cdots$ の正の整数であり，これを**主量子数**という．この主量子数 n を用いて k を消去すると，$H^{(1)}$ の固有値は

$$\varepsilon^{(n)} = -1/n^2, \qquad n = 1,2,3,\cdots \tag{4.13}$$

と表わされる．したがって，水素型原子のエネルギー固有値 E_n は

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2\cdot\frac{1}{n^2} \tag{4.14}$$

で与えられ，これは第1章(1.10)の Bohr の原子模型の結果と一致する．なお，主量子数 n は $1,2,3,\cdots$，方位量子数 $l=n-k$ は $0,1,2,\cdots,n-1$，磁気量子数 m は $l,l-1,\cdots,-l$ の $(2l+1)$ 個の値をとるから，主量子数 n で指定されるエネルギー E_n の状態の縮退数は

$$\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$$

で与えられる．また後に説明するように，電子はスピンによる2個の自由度をもつので，これを考慮すると固有値 E_n に属する状態は $2n^2$ 重に縮退している．

量子数 n と l を用いて，$u_l{}^{(n)} \equiv u_{l+k}$ と書くと，(4.12)は

$$u_l{}^{(n)} = b_{l+1}{}^\dagger b_{l+2}{}^\dagger \cdots b_{n-1}{}^\dagger \phi^{(n-1)}, \qquad l = 0, 1, \cdots, n-1 \tag{4.15}$$

と表わされる．またこのとき，(4.9)は

$$b_n \phi^{(n-1)} = \left[\frac{1}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} + i\left(\frac{n}{\rho} - \frac{1}{n}\right)\right]\phi^{(n-1)} = 0 \tag{4.16}$$

となる．この微分方程式の解が

$$\phi^{(n-1)}(\rho) = c_n \rho^n \mathrm{e}^{-\rho/n} \tag{4.17}$$

であることは，これを(4.16)に代入してみれば容易にたしかめられる．なお，c_n は積分定数で，この値は規格化条件によって決まる．

ここで n の小さい値の場合に，(4.15)を書き出してみよう．まず $n=1$ のとき，$l=0$ のみが許されるから

$$u_0{}^{(1)} = \phi^{(0)}, \tag{4.18}$$

$n=2$ のとき，$l=1,0$ より

$$u_1{}^{(2)} = \phi^{(1)}, \qquad u_0{}^{(2)} = b_1{}^\dagger \phi^{(1)}, \tag{4.19}$$

$n=3$ のとき，$l=2,1,0$ より

$$u_2{}^{(3)} = \phi^{(2)}, \qquad u_1{}^{(3)} = b_2{}^\dagger \phi^{(2)}, \qquad u_0{}^{(3)} = b_1{}^\dagger b_2{}^\dagger \phi^{(2)} \tag{4.20}$$

である．これらの表式をながめると，$u_l{}^{(n)}$ の l の値を固定したとき，演算子 $b^\dagger$ は n の値を上昇させ，また n の値を固定したときには，l の値を降下させる演算子であることが分かる．

ここで，$n=1$ と2の場合について，動径関数 $u_l{}^{(n)}(\rho)$ を具体的に与えておこう．(4.17)より，$n=1$ のとき

$$u_0{}^{(1)} = \phi^{(0)} = 2\rho \mathrm{e}^{-\rho}$$

であり，$n=2$ のときは

$$u_1{}^{(2)} = \phi^{(1)} = (1/2\sqrt{6})\rho^2 \mathrm{e}^{-\rho/2},$$

$$u_0{}^{(2)} = b_1{}^\dagger \phi^{(1)} = \left[\frac{1}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} - i\left(\frac{1}{\rho} - 1\right)\right]\phi^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[1 - \frac{\rho}{2}\right]\rho \mathrm{e}^{-\rho/2}$$

である．なお，ここで与えた固有関数 $u_l^{(n)}$ は

$$\int_0^\infty |u_l^{(n)}(\rho)|^2 \mathrm{d}\rho = 1$$

により規格化されている．$R_{n,l}=u_l^{(n)}/\rho$ の関係を用いると

$$\begin{aligned} R_{1,0}(\rho) &= 2\mathrm{e}^{-\rho}, \\ R_{2,1}(\rho) &= (1/2\sqrt{6})\rho \mathrm{e}^{-\rho/2}, \\ R_{2,0}(\rho) &= (1/\sqrt{2})(1-\rho/2)\mathrm{e}^{-\rho/2} \end{aligned} \tag{4.21}$$

である．

(4.21)を用いると，水素型原子の束縛状態の規格化された固有関数の完全な形は

$$\psi_{n,l,m}(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{Z^3}{a_0{}^3}} R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta,\varphi) \tag{4.22}$$

で与えられる．$n=1,2$ のとき，これは次のようになる．

$$\begin{aligned} \psi_{1,0,0}(r,\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{Z^3}{a_0{}^3}} \cdot 2\mathrm{e}^{-Zr/a_0} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ \psi_{2,0,0}(r,\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{Z^3}{a_0{}^3}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1-\frac{Zr}{2a_0}\right) \mathrm{e}^{-Zr/2a_0} \cdot \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \\ \psi_{2,1,0}(r,\theta,\varphi) &= \sqrt{\frac{Z^3}{a_0{}^3}} \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) \mathrm{e}^{-Zr/2a_0} \cdot \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta, \\ \psi_{2,1,\pm1}(r,\theta,\varphi) &= \mp \sqrt{\frac{Z^3}{a_0{}^3}} \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Zr}{a_0}\right) \mathrm{e}^{-Zr/2a_0} \cdot \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta \, \mathrm{e}^{\pm i\varphi}. \end{aligned} \tag{4.23}$$

なお(4.22)で，主量子数 n の異なる固有関数は，第2章(1.17)の一般論によって直交し，また§2(2.40)のときに述べたように，l と m の異なる固有関数も直交している．

§5　粒子のポテンシャルによる散乱

(1)　散乱断面積

原子などの微小な対象の構造を調べるときに利用される方法の一つは，何かの粒子をいま調べようとしている対象に衝突させて，それによって散乱されてくる粒子の分布を測定することである．仮に木箱のなかに特定の形をもつ小石を規則正しく並べて固定しておいたとする．この小石の形や並べ方を木箱を明

けずに知るために，木箱に向けてピストルを乱射したとする．このとき，素通りしてくる弾の数や，石に衝突して散乱された弾の角分布などから，木箱のなかの小石の形やその並べ方を推測することができる．しかし，このような推測をするには，あらかじめ小石の形やそれらの並べ方を仮定したうえで，散乱されてくる弾の角分布などを理論的に計算しておく必要がある．上の例で，弾丸を光子，電子，陽子などに，ピストルを粒子加速器に，そして木箱を結晶板に，そのなかの小石を原子や原子核におきかえれば，話は現実のものとなる．このように考えると，散乱現象の物理学で占める役割の重要性を理解できよう．それでは，そのような実験で観測される物理量はどのようなものであろうか．

いま，図3.2に示されているように，スリットSを通ってz軸に平行に入射する粒子が，原点Oにおかれている標的に衝突して散乱されるものとする．このとき，実験で直接観測できるのは，標的から十分に遠くに離れた場所に散乱されてくる粒子数である．いま，z軸の正の方向に単位面積のスリットSを通って入射する毎秒当りの粒子数をNとし，また原点Oを中心とする半径rの球面上の面要素$\mathrm{d}S$内に毎秒到達する粒子数をΔNとする．この粒子数は，$\Delta N \propto N\mathrm{d}S/r^2$である．検出器上の面要素$\mathrm{d}S$を原点からみた立体角を$\mathrm{d}\Omega$とすると，$\mathrm{d}\Omega=\mathrm{d}S/r^2$であるから，

$$\Delta N = \sigma(\theta) N \mathrm{d}\Omega \tag{5.1}$$

である．ここで比例定数$\sigma(\theta)$のなかのθは，粒子が衝突によってz軸からそ

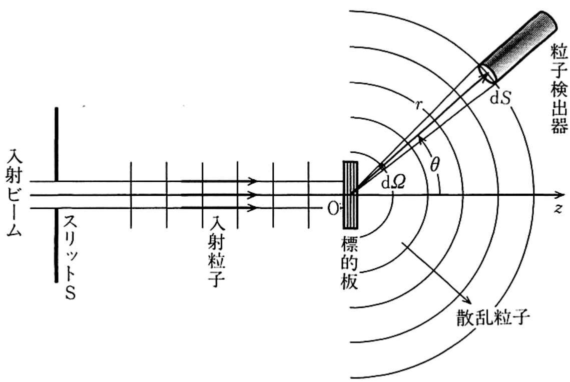


図3.2　散乱の実験

れた角度であり，これを**散乱角**という．また$\sigma(\theta)$は，単位面積当り毎秒1個の粒子が入射してくるとき，散乱角θの方向の単位立体角のなかに散乱されてくる粒子数の割合を表わしている．$[N]=\mathrm{m}^{-2}\cdot\mathrm{s}^{-1}$, $[\Delta N]=\mathrm{s}^{-1}$であるから，$[\sigma(\theta)]=\mathrm{m}^2$となり，$\sigma(\theta)$は面積の次元をもつ．そこで$\sigma(\theta)$を散乱の**微分断面積**という．これを全立体角にわたって積分した

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = \int\sigma(\theta)\mathrm{d}\Omega = 2\pi\int_0^{\pi}\sigma(\theta)\cdot\sin\theta\,\mathrm{d}\theta \tag{5.2}$$

を散乱の**全断面積**という．これは単位面積のスリットを通って，毎秒1個の粒子が入射するとき，散乱されてくる全粒子数の割合である．

古典的粒子が，球形の標的粒子に衝突する場合に，全断面積は球の幾何学的断面積に等しい．したがって，原子による電子の散乱の場合には，散乱の全断面積の大きさは，Bohr 半径$a_0=5.29\times10^{-11}$ m の2乗の程度の大きさであり，大よそ$\sigma^{\mathrm{tot}}\sim a_0{}^2=2.8\times10^{-21}\ \mathrm{m}^2$である．

実験で利用される標的は1個の原子ではなく，多数の原子からなる薄い結晶板を重ね合わせたものである．このとき，結晶板の表面から測って深さzのところで，まだ散乱を受けずにいる単位面積当りの粒子数を$N(z)$としたとき，zから$z+\mathrm{d}z$の間の薄い層を進む間に，衝突によって，z方向からそれて失われる粒子数は$n\sigma^{\mathrm{tot}}N(z)\mathrm{d}z$で与えられる．ここで$n$は標的粒子の単位体積当りの数である．標的板が厚すぎると，入射粒子は標的の内部で2度，3度と衝突を繰りかえして，いわゆる多重散乱をおこす．すると，散乱されて標的外に出てくる粒子数ΔNは，標的板の厚さに比例しなくなる．それを避けるために，標的板を薄くするのである．さて，$z+\mathrm{d}z$の場所でまだ標的粒子に衝突していない粒子数$N(z+\mathrm{d}z)$は

$$N(z+\mathrm{d}z) = N(z)-n\sigma^{\mathrm{tot}}N(z)\mathrm{d}z$$

で与えられる．これより，微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}N(z)}{\mathrm{d}z} = -n\sigma^{\mathrm{tot}}N(z)$$

がえられる．標的板の表面$z=0$における入射粒子数を$N(0)$とすると，上の方程式の解は

$$N(z) = N(0)\exp[-n\sigma^{\mathrm{tot}}\cdot z] \tag{5.3}$$

である．そこで標的板の厚さ z を変えて，衝突せずに素通りしてくる粒子数 $N(z)$ を測定することにより，全断面積 σ^{tot} を実験によって決定することができる．また，散乱角 θ の異なる場所に粒子検出器をおいて，それぞれの散乱角の場所で観測される粒子の相対強度を求め，それらの全立体角上の積分値が，すでに測定ずみの全断面積の値に一致するように，その絶対値を決める．こうして微分断面積 $\sigma(\theta)$ を求めることができる．

散乱現象を理論的に解析する方法には二つのやり方がある．その一つは，Schrödinger の方程式の正の連続固有値に属する定常解を，散乱現象に適合する境界条件のもとで求める方法であり，もう一つの方法は，入射粒子の状態が標的粒子との相互作用によって，他の状態に転移すると考えて，その転移確率を計算する方法である．ここでは，第1の定常解を求める方法でこの問題を扱い，第2の方法については，第5章§2で説明する．なお，これらの全く異なる二つの方法を統一するのが，第7章の散乱の一般論である．

一定のエネルギー E と運動量 $\boldsymbol{p}$ をもつ粒子が，ポテンシャル $V(r)$ によって散乱されるとき，この系を記述する定常状態に対する Schrödinger 方程式は

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi(\boldsymbol{r})+V(r)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{5.4}$$

で与えられる．ここで，ポテンシャル関数 $V(r)$ は，散乱の中心Oから遠ざかるとともに十分にはやく0に近づくものと仮定する．$V(r)\sim r^{-1}$ の Coulomb ポテンシャルの場合には，以下の理論は適用できないので特別な扱いが必要となる．しかしそれは極めて例外的なものなので，本書ではこの問題の議論は省略する．

束縛状態のときと異なり，(5.4)の E は入射粒子のエネルギーであり，その値は実験者が勝手な値を与えることができ，正でかつ連続的な値をとることができる．そこで，$k^2=2mE/\hbar^2$，$U=2mV/\hbar^2$ とおくと，(5.4)の方程式は

$$(\triangle+k^2)\psi(\boldsymbol{r}) = U\psi(\boldsymbol{r}) \tag{5.5}$$

となる．k^2 を与えられたものとして(5.5)を解くには，いま考えている散乱問題に適合した境界条件を与える必要がある．図3.2に示したように，ポテンシャル $V(r)$ の存在する標的系から十分に遠方では，系の波動関数は，z 軸の正の方向に進行する入射平面波と，外向きの球面波から構成されている．Cou-

lomb ポテンシャルの場合には，その作用が無限遠方でも消えないので，入射波を平面波で記述することができないのである．ポテンシャルの作用が十分遠方で消えるとき，$r\to\infty$ における波動関数 $\psi^{(+)}$ は

$$\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}) \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} \mathrm{e}^{ikz}+\frac{f(\theta)}{r}\mathrm{e}^{ikr}, \qquad k>0 \tag{5.6}$$

の形で表わされる．なお，$\psi^{(+)}$ のプラスの添字は右辺の球面波が外向きの波であることを示すものである．(5.6)の波動の進行方向がそのようになっていることは，(5.6)に $\exp[-iEt/\hbar]$ を掛けてみれば分かる．(5.6)の右辺の第1項の入射波は

$$\int_0^1 \mathrm{d}x\int_0^1 \mathrm{d}y\int_0^1 \mathrm{d}z\,|\mathrm{e}^{ikz}|^2 = 1 \tag{5.7}$$

により規格化されているので，入射粒子の数は単位体積中に1個である．このとき，この入射平面波 $\phi_{\boldsymbol{k}}\equiv\exp(ikz)$ の確率の流れの密度，すなわち単位断面積を通って毎秒入射してくる粒子数 N は，第1章(3.9)により

$$N = j_z = \frac{\hbar}{2mi}\left[\phi_{\boldsymbol{k}}{}^*\frac{\partial\phi_{\boldsymbol{k}}}{\partial z}-\phi_{\boldsymbol{k}}\frac{\partial\phi_{\boldsymbol{k}}{}^*}{\partial z}\right] = \frac{\hbar k}{m} = v \tag{5.8}$$

で与えられる．ここで v は入射粒子の速さである．一方，外向きの球面波で表わされる散乱波 $\chi=f(\theta)\exp(ikr)/r$ の r 方向の流れの密度は

$$j_{r\to\infty} = \frac{\hbar}{2mi}\left(\chi^*\frac{\partial\chi}{\partial r}-\chi\frac{\partial\chi^*}{\partial r}\right)_{r\to\infty} \cong \frac{v}{r^2}|f(\theta)|^2 \tag{5.9}$$

である．ここで r^{-2} よりはやく消える項は落している．これより，図3.2の面要素 $\mathrm{d}S$ のなかに毎秒はいってくる粒子数 $\varDelta N$ は

$$\varDelta N = j_{r\to\infty}\mathrm{d}S = \frac{v}{r^2}|f(\theta)|^2\mathrm{d}S = v|f(\theta)|^2\mathrm{d}\varOmega \tag{5.10}$$

である．したがって，(5.1),(5.8)および(5.10)から

$$\sigma(\theta)\mathrm{d}\varOmega = \varDelta N/N = |f(\theta)|^2\mathrm{d}\varOmega \tag{5.11}$$

となる．すなわち，散乱の微分断面積は，(5.6)の散乱波の振幅 $f(\theta)$ の絶対値の2乗で与えられる．

(2)　散乱の積分方程式

(5.5)の微分方程式の一般解は，次のような形に表わすことができる．

$$\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}) = \phi(\boldsymbol{r}) + \chi(\boldsymbol{r}). \tag{5.12}$$

ここで

$$(\triangle + k^2)\phi(\boldsymbol{r}) = 0, \qquad (\triangle + k^2)\chi(\boldsymbol{r}) = U\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}) \tag{5.13}$$

である．(5.12)が(5.5)をみたすことは明らかであろう．そこで(5.13)の第2式の右辺の $\psi^{(+)}(\boldsymbol{r})$ が既知であると仮定して，(5.13)の第2式の特解として，

$$\chi(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r' \tag{5.14}$$

を採用する．(5.14)が(5.13)の第2式をみたすことは，次のようにして示される．図3.3に示すように，(5.14)の無限大の積分領域 V を，観測点 $\boldsymbol{r}$ を中心とする無限小の半径 ε の球状の領域 V_ε と，その領域を除外した無限大の領域 V' に分割する．すると，(5.14)の右辺は

$$\begin{aligned}\chi_\varepsilon(\boldsymbol{r}) &= -\frac{1}{4\pi}\int_{V_\varepsilon}\frac{\mathrm{e}^{ikR}}{R}U(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r', \\ \chi'(\boldsymbol{r}) &= -\frac{1}{4\pi}\int_{V'}\frac{\mathrm{e}^{ikR}}{R}U(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'\end{aligned} \tag{5.15}$$

の2個の和に分割される．ここで $R=|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ である．

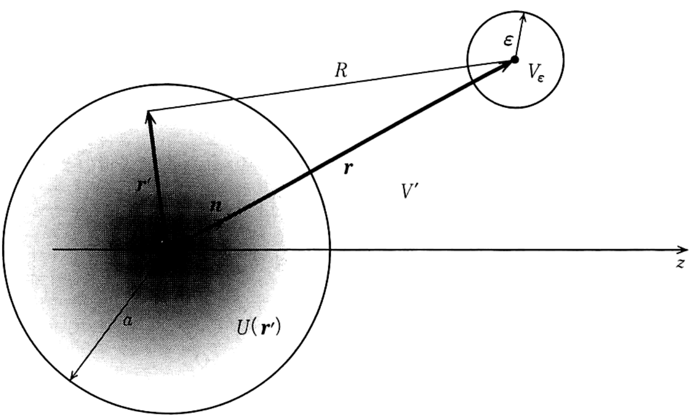


図3.3　散乱の積分方程式

さて，積分変数 $\boldsymbol{r}'$ が領域 V_ε 内にあるときには，$R \leqq \varepsilon$ であるから，$\varepsilon \to 0$ の極限で $\mathrm{e}^{ikR} \cong 1$ とみなすことができる．このとき

$$\triangle\chi_\varepsilon(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\int_{V_\varepsilon}\triangle\left(\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right)U(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'$$
$$= \int_{V_\varepsilon}\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r' = U(\boldsymbol{r})\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}) \quad (5.16)$$

である．ここで問8の結果を利用している．次に領域 V' ではつねに $R\neq 0$ であるから，

$$\triangle\left(\frac{\mathrm{e}^{ikR}}{R}\right) = \left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}R^2}+\frac{2}{R}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}R}\right)\frac{\mathrm{e}^{ikR}}{R} = \frac{1}{R}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}R^2}\left(R\cdot\frac{\mathrm{e}^{ikR}}{R}\right) = -k^2\frac{\mathrm{e}^{ikR}}{R} \quad (5.17)$$

と計算してよい．したがって

$$\triangle\chi'(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\int_{V'}\triangle\left(\frac{\mathrm{e}^{ikR}}{R}\right)U(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'$$
$$= +\frac{1}{4\pi}k^2\int_{V'}\frac{\mathrm{e}^{ikR}}{R}U(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r' = -k^2\chi(\boldsymbol{r}). \quad (5.18)$$

ここで最後の等号では $U\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}')$ は観測点 $\boldsymbol{r}$ で特異点をもたないので，$\varepsilon\to 0$ の極限で積分領域 V' を全領域 V におきかえてよいことを利用している．上の(5.16)と(5.18)を加えると

$$\triangle\chi(\boldsymbol{r}) = \triangle\chi_\varepsilon(\boldsymbol{r})+\triangle\chi'(\boldsymbol{r}) = U(\boldsymbol{r})\psi^{(+)}(\boldsymbol{r})-k^2\chi(\boldsymbol{r})$$

である．こうして，(5.14)が(5.13)の第2式の解であることが証明された．

次に，(5.13)の第1式の解は $\phi(\boldsymbol{r})=\exp(i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})$ である．ここで $\boldsymbol{k}=(0,0,k)$ と選ぶと，(5.12)は

$$\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{ikz}-\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r' \quad (5.19)$$

と表わされる．これまでは，(5.13)の第2式の右辺の $\psi^{(+)}$ は既知であると仮定してきた．そのために，(5.19)の右辺の第2項には，求めるべき $\psi^{(+)}$ が含まれていて，(5.19)を(5.5)の微分方程式の解とするわけにはいかない．つまり(5.19)は，無限遠方での境界条件(5.6)を考慮した積分方程式である．これを**散乱の積分方程式**という．

積分方程式(5.19)が(5.6)の境界条件をみたしていることは，次のようにして示される．図3.3のように，ポテンシャル $U(\boldsymbol{r})$ の存在する領域が半径 a の内部に局限されているとき，(5.19)の右辺の積分変数 $\boldsymbol{r}'$ の動く領域は U が0

でない範囲に限られる．したがって，観測点 $\boldsymbol{r}$ を十分に遠方にとれば，$r \gg r'$ である．このとき

$$|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| = \sqrt{r^2+r'^2-2(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}')r} \cong r-(\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}')$$

と展開される．ここで $\boldsymbol{n}$ は散乱方向の単位ベクトルで $\boldsymbol{r}=r\boldsymbol{n}$ である．また

$$1/|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| \cong (1+\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{r}'/r)/r \cong 1/r$$

である．これらを(5.19)の右辺に代入すると

$$\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}) \xrightarrow[r\to\infty]{} \mathrm{e}^{ikz}+\frac{\mathrm{e}^{ikr}}{r}\left[-\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'}U(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right]$$

となる．ここで $\boldsymbol{k}'=k\boldsymbol{n}$ は散乱方向の粒子の波数ベクトルである．この漸近形と(5.6)を比較すると

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}'}U(\boldsymbol{r}')\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \qquad (5.20)$$

をえる．すなわち，(5.19)の積分方程式は(5.6)の境界条件をみたしており，また(5.20)を(5.11)に代入することによって，微分断面積 $\sigma(\theta)$ を求めることができる．

(3)　Born 近似

散乱振幅 $f(\theta)$ を求めるには，(5.20)の右辺の $\psi^{(+)}$ を与えなくてはならない．それには(5.19)の積分方程式を解く必要があるが，ほとんどの場合それは不可能である．そこで(5.20)の右辺の $\psi^{(+)}$ を，(5.19)の右辺の第1項で近似するのが **Born 近似**である．この近似のもとで，(5.20)は

$$f(\theta) = -\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{+i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}'}U(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' \qquad (5.21)$$

と表わされる．このとき，微分断面積は

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\left|\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}'}V(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right|^2 \qquad (5.22)$$

で与えられる．すなわち，散乱断面積を Born 近似で求めるには，(5.22)の積分を実行するだけでよい．なおこのとき，断面積の値はポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ の符号に関係しないことに注意されたい．

ここで，Born 近似の成立条件を調べておこう．この問題の厳密な議論は非常に面倒なものになるので，ここでは物理的直観にもとづいて，この近似が成

立する十分条件を求めるだけにとどめておく．(5.19)の積分方程式を逐次展開すると

$$\psi^{(+)}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(r')\mathrm{e}^{ikz'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}' + \cdots\cdots \qquad (5.23)$$

となる．(5.21)の $f(\theta)$ に寄与するのは，$U(r)$ が 0 でない原点 O の近傍の $\psi^{(+)}$ である．そこで(5.23)の右辺の第 2 項で，$\boldsymbol{r}\cong 0$ とすると，(5.23)の展開が収束するためには

$$\frac{1}{4\pi}\left|\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{ikr'}}{r'}U(r')\mathrm{e}^{ikz'}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}'\right| \ll 1 \qquad (5.24)$$

であれば十分である．U の大きさを U_0，U が 0 でない領域の半径を a として，(5.24)の角積分を実行すると

$$(|U_0|/4k^2)|\mathrm{e}^{2ika}-2ika-1| \ll 1 \qquad (5.25)$$

となる．入射エネルギーが低くて $ka\ll 1$ のとき，指数関数をベキ展開すると，(5.25)は

$$|U_0|a^2/2 \ll 1 \qquad (5.26)$$

となる．すなわち，低エネルギー粒子の散乱の場合には，ポテンシャルの強さ $|U_0|$ が小さく，またその有効領域の半径 a が小さいとき，Born 近似は意味をもつ．これに対して，入射粒子のエネルギーが大きくて $ka\gg 1$ のときには，(5.25)の指数関数は k の小さな変化に対しても激しく振動するので，実質的にこの項を無視してよい．このとき，(5.25)の条件は $|U_0|a/2k\ll 1$ となる．これを $U_0=2mV_0/\hbar^2$ と $v=\hbar k/m$ を用いて書き直すと

$$|V_0|a/\hbar v \ll 1 \qquad (5.27)$$

となる．すなわち，$|V_0|$ が小さく，また入射粒子の速さ v が十分に大きいとき，Born 近似は有効である．(5.27)の条件は，入射粒子がポテンシャルの存在する領域を通過する時間 a/v が，ポテンシャルが粒子に十分に影響を与えられる時間 $\hbar/|V_0|$ に比較して短いとき，この近似が正しいということを意味している．

問 27 ポテンシャル $V(r)=-(e^2/4\pi\varepsilon_0)\mathrm{e}^{-\alpha r}/r$ による電子の散乱の微分断面積を Born 近似で求め，定数 $\alpha\to 0$ の極限で，その結果が Rutherford 散乱の微分断面積を与えることを示せ．

(4) 部分波展開による近似

Born 近似は，一般に入射粒子のエネルギーが大きいときによい近似であるとされている．それでは，粒子のエネルギーが低いときには，どのような近似法を用いたらよいだろうか．束縛状態の場合には，ポテンシャル $V(r)$ が原点Oのまわりで球対称のとき，Oを原点とする極座標系を用いると見通しのよい結果がえられた．そのとき，角運動量の2乗 $\boldsymbol{L}^2$ と z 軸のまわりの角運動量 L_z の固有値を指定する量子数 l と m が重要な意味をもっていた．散乱状態でも，この角運動量の量子数が重要な意味をもっている．すなわち，低エネルギーの粒子の散乱においては，角運動量の値の小さいものだけが散乱に寄与することが，次のような定性的な議論によっても知ることができる．いま，図3.4に示すように，ポテンシャル $V(r)$ は半径 a の領域のなかにだけ存在すると仮定する．このポテンシャルに向かって，運動量 p，衝突径数 b の粒子が入射してくるとき，散乱がおきるのは，$b<a$ のときだけで，$b>a$ のときには粒子はそのまま素通りしてしまう．この粒子が原点Oのまわりにもつ角運動量の値は，$pb=\hbar k\cdot b\cong\hbar l$ $(l=0,1,2,\cdots)$ である．したがって，$b=l/k$ となるから，散乱がおきるのは $l\leqq ak$ の条件をみたすときだけである．入射粒子のエネルギーが低くて，k の値が小さいとき，$l\leqq ak$ の条件をみたす l の値は0か1の程度のものだけで，l の大きい値は散乱に寄与しない．そこで，散乱の波動関数を角運動量の固有関数で展開することによって，低エネルギー散乱でのよい近似がえられると期待される．この方法を**部分波展開法**という．

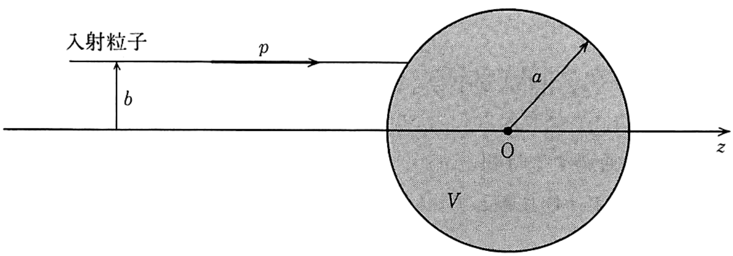


図3.4　散乱現象と角運動量

Schrödinger 方程式(5.5)を極座標系で表わし

$$\psi(\boldsymbol{r}) = R_l(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

とおくと，動径関数 $R_l(r)$ は，(3.3)と同形の方程式

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l(r)+U(r)R_l(r) = k^2R_l(r) \qquad (5.28)$$

をみたす．したがって(5.5)の方程式の一般解は，任意の係数 $C_{l,m}$ を用いて

$$\psi^{(+)}(r,\theta,\varphi) = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l} C_{l,m}R_l(r)Y_{l,m}(\theta,\varphi)$$

と表わされる．しかしいまの場合は，ポテンシャル関数 $U(r)$ も，入射波の波動関数 e^{ikz} も，z 軸のまわりで対称であるから，一般解としても $m=0$ の場合だけを考えればよい．このとき，(2.40)より

$$Y_{l,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\frac{(-1)^l}{2^l\cdot l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}\xi^l}(1-\xi^2)^l \ ; \quad \xi = \cos\theta \qquad (5.29)$$

である．ここで **Legendre 関数**を

$$P_l(\xi) = \frac{(-1)^l}{2^l\cdot l!}\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}\xi^l}(1-\xi^2)^l \qquad (5.30)$$

で定義する．これの l の値の小さいときの表式を具体的に書くと，

$$\begin{aligned}&P_0(\xi) = 1, \quad P_1(\xi) = \xi, \quad P_2(\xi) = (1/2)(3\xi^2-1),\\ &P_3(\xi) = (1/2)(5\xi^3-3\xi), \quad \cdots\cdots.\end{aligned} \qquad (5.31)$$

また $P_l(1)=1$, $P_l(-1)=(-1)^l$ である．(5.30)が **Legendre の微分方程式**

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left[(1-\xi^2)\frac{\mathrm{d}P_l(\xi)}{\mathrm{d}\xi}\right]+l(l+1)P_l(\xi) = 0$$

の解であることも容易に示される．(5.30)を用いると，(5.29)は

$$Y_{l,0}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}P_l(\cos\theta)$$

と表わされる．このとき，$Y_{l,0}(\theta,\varphi)$ の直交規格化性から

$$\int_0^{\pi}P_l(\cos\theta)\cdot P_{l'}(\cos\theta)\sin\theta\,\mathrm{d}\theta = \frac{2}{2l+1}\cdot\delta_{l,l'} \qquad (5.32)$$

であることが分かる．(5.30)の Legendre 関数を利用すると，(5.5)の方程式の z 軸のまわりに対称な一般解は

$$\psi^{(+)}(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}C_lR_l(r)P_l(\cos\theta) \qquad (5.33)$$

と書くことができる．ここで C_l は未定の展開係数である．

全波動関数 $\psi^{(+)}$ を $P_l(\cos\theta)$ で展開したのだから，(5.6)の $r\to\infty$ での漸近形も同じように展開しておいたほうがよいだろう．このとき，(5.6)の右辺の平面波は

$$\mathrm{e}^{ikz} = \mathrm{e}^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta) \tag{5.34}$$

と展開される．これを **Rayleigh の公式**という(問28参照)．ここで(3.14)を用いると，

$$\mathrm{e}^{ikz} \xrightarrow[r\to\infty]{} \sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2ikr}[\mathrm{e}^{ikr}-(-1)^l\mathrm{e}^{-ikr}]P_l(\cos\theta) \tag{5.35}$$

である．また未定の散乱振幅 $f(\theta)$ も完全系 $P_l(\cos\theta)$ で展開し

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2i}a_l P_l(\cos\theta) \tag{5.36}$$

と表わしておく．(5.35)と(5.36)を(5.6)に代入すると，

$$\psi^{(+)}(r,\theta) \xrightarrow[r\to\infty]{} \sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2ikr}[(1+a_l)\mathrm{e}^{ikr}-(-1)^l\mathrm{e}^{-ikr}]P_l(\cos\theta) \tag{5.37}$$

である．また，(5.36)を(5.11)に代入すれば，微分断面積は未定の定数 a_l を用いて，

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2}\left|\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2}a_l P_l(\cos\theta)\right|^2 \tag{5.38}$$

と表わされる．したがって，全断面積は(5.32)の直交性によって

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = 2\pi\int_0^{\pi}\sigma(\theta)\cdot\sin\theta\,\mathrm{d}\theta = \frac{2\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2}a_l^* a_l \tag{5.39}$$

と書くことができる．

漸近形(5.37)の右辺の括弧のなかの第2項は，原点Oに向かって集中してくる球面波を，また第1項は，原点Oから外に発散してゆく球面波を表わしている．このとき，確率の保存則によって，両者の振幅の絶対値が等しいことが要求される．すなわち，$|1+a_l|=1$ でなければならない．これより次の条件がえられる．

$$a_l^* + a_l + a_l^* a_l = 0. \tag{5.40}$$

一方，$P_l(1)=1$ であるから，(5.36)より，散乱角 $\theta=0$ の前方散乱の振幅は

$$f(0) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{2i}a_l$$

である．これより

$$(2\pi/ik)[f(0)-f^*(0)] = -(2\pi/k^2)\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)[a_l+a_l^*]/2 \tag{5.41}$$

をえる．ここで，(5.41)と(5.39)を(5.40)に代入すると

$$\sigma^{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k}\mathcal{I}_m f(0) \tag{5.42}$$

の関係がえられる．(5.40)の確率の保存則からえられた(5.42)の関係を**光学定理**という．

一方，$|1+a_l|=1$ であるから，実数のパラメーター δ_l を用いて，

$$1+a_l = e^{2i\delta_l} \tag{5.43}$$

と書くことができる．この δ_l を用いると，(5.36)は

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{i\delta_l}\sin\delta_l\cdot P_l(\cos\theta), \tag{5.44}$$

また(5.38)の全断面積は

$$\sigma^{\text{tot}} = \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\sin^2\delta_l \tag{5.45}$$

と表わされる．(5.43)で定義される δ_l を**位相のずれ**という．それは，(5.43)を用いると，(5.37)の全波動関数の漸近形が

$$\psi^{(+)}(r,\theta) \xrightarrow[r\to\infty]{} \sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{kr}e^{i\delta_l}\cdot i^l\cdot\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}+\delta_l\right)P_l(\cos\theta)$$

となるのに対して，入射波の漸近形は

$$e^{ikz} \xrightarrow[r\to\infty]{} \sum_{l=0}^{\infty}\frac{(2l+1)}{kr}i^l\cdot\sin\left(kr-\frac{l\pi}{2}\right)P_l(\cos\theta)$$

となり，前者は後者に比べて位相が δ_l だけずれているからである．

以上の話は，漸近形(5.6)を球面波で表現することによって，散乱問題を位相のずれ δ_l を求める問題に帰着させただけのことである．この未定の位相の

ずれ δ_l を決定するには，(5.28)の動径関数 $R_l(r)$ のみたす方程式の解を求めなければならない．

そこで，$u_l(r)=rR_l(r)$ とおくと，(5.28)の方程式は

$$\frac{\mathrm{d}^2 u_l(r)}{\mathrm{d}r^2}+\left[k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u_l(r) = U(r)u_l(r) \tag{5.46}$$

となる．このとき(1.37)の条件より，原点Oで

$$u_l(0) = 0 \tag{5.47}$$

が要求される．また，ポテンシャル $U(r)$ が $r=a$ で不連続のとき，ポテンシャルの内側の解 $u^{\mathrm{in}}(r)$ と，外側の解 $u^{\mathrm{ex}}(r)$ の対数微分が，$r=a$ で連続であることが要求される．すなわち，

$$\left.\frac{\mathrm{d}u_l{}^{\mathrm{in}}}{\mathrm{d}r}\middle/u_l{}^{\mathrm{in}}\right|_{r=a} = \left.\frac{\mathrm{d}u_l{}^{\mathrm{ex}}}{\mathrm{d}r}\middle/u_l{}^{\mathrm{ex}}\right|_{r=a}. \tag{5.48}$$

(5.47)と(5.48)の条件によって，位相のずれ δ_l が決まることになる．

ここで，井戸型ポテンシャル

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 \ (V_0>0), & r<a, \\ 0, & r\geqq a \end{cases} \tag{5.49}$$

による低エネルギー粒子の散乱を例にとって，問題の解を求めよう．E の値が小さいとき，$k=\sqrt{2mE/\hbar^2}$ も小さいので $l<ak$ の条件により，$l=0$ の波だけが散乱に寄与する．$l=0$ の状態をs状態というので，これをs波の散乱という．このとき，(5.46)の方程式は

$$\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}^2 u_0{}^{\mathrm{in}}}{\mathrm{d}r^2}+(U_0+k^2)u_0{}^{\mathrm{in}} = 0, && r<a, \\ &\frac{\mathrm{d}^2 u_0{}^{\mathrm{ex}}}{\mathrm{d}r^2}+k^2 u_0{}^{\mathrm{ex}} = 0, && r\geqq a \end{aligned} \tag{5.50}$$

となる．ここで $U_0=2mV_0/\hbar^2$ である．ポテンシャルの外側の第2の方程式の一般解は

$$u_0{}^{\mathrm{ex}}(r) = A\sin(kr+\delta_0) \tag{5.51}$$

で与えられる．

そこで，(5.51)の一般解を(5.37)の漸近形と比較してみよう．$l=0$ のとき，(5.37)は

$$\psi_0{}^{(+)} \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{1}{2ikr}[(1+a_0)\mathrm{e}^{ikr}-\mathrm{e}^{-ikr}] \tag{5.52}$$

であり，また(5.36)は$f=a_0/2ik$ となる．一方，(5.51)の一般解は

$$\psi_0{}^{(+)} = \frac{u_0{}^{\mathrm{ex}}}{r} = \frac{A}{2ir}\mathrm{e}^{-i\delta_0}[\mathrm{e}^{2i\delta_0}\mathrm{e}^{ikr}-\mathrm{e}^{-ikr}] \tag{5.53}$$

と変形される．(5.52)と(5.53)を比較すると

$$A = \mathrm{e}^{i\delta_0}/k, \qquad 1+a_0 = \mathrm{e}^{2i\delta_0} \tag{5.54}$$

であることが分かる．したがって

$$f = a_0/2ik = (1/2ik)(\mathrm{e}^{2i\delta_0}-1)$$

である．すなわち，(5.51)の解は，漸近条件(5.52)と，$|1+a_0|=1$ の条件をみたしており，また全断面積は(5.51)の δ_0 を用いて，次式で与えられる．

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = 2\pi\int_0^\pi |f|^2 \sin\theta\,\mathrm{d}\theta = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta_0. \tag{5.55}$$

さて，問題は(5.51)の一般解の δ_0 を求めることである．そのために(5.50)のポテンシャルの内部の方程式を解くと，その一般解は

$$u_0{}^{\mathrm{in}}(r) = B_1\mathrm{e}^{i\kappa r}+B_2\mathrm{e}^{-i\kappa r}$$

である．ここで $\kappa=\sqrt{U_0+k^2}$ である．(5.47)の条件より，$B_1+B_2=0$ であるから，$B_1=-B_2=B/2$ とおくと

$$u_0{}^{\mathrm{in}}(r) = B\sin(\sqrt{U_0+k^2}\cdot r) \tag{5.56}$$

をえる*．ここで(5.48)の連続の条件を用いると，(5.51)と(5.56)とから，条件式

$$\kappa a\cot\kappa a = ka\cot(ka+\delta_0) \tag{5.57}$$

がえられる．これより

$$\cot\delta_0 = \frac{ka+\kappa a\cot\kappa a\cdot\cot ka}{ka\cot ka-\kappa a\cot\kappa a} \tag{5.58}$$

となる．こうして位相のずれ δ_0 が決まった．あるいは

$$\sin^2\delta_0 = \frac{1}{1+\cot^2\delta_0} = \frac{(ka\cot ka-\kappa a\cot\kappa a)^2\cdot\sin^2 ka}{(ka)^2+(\kappa a)^2\cot^2\kappa a}$$

---

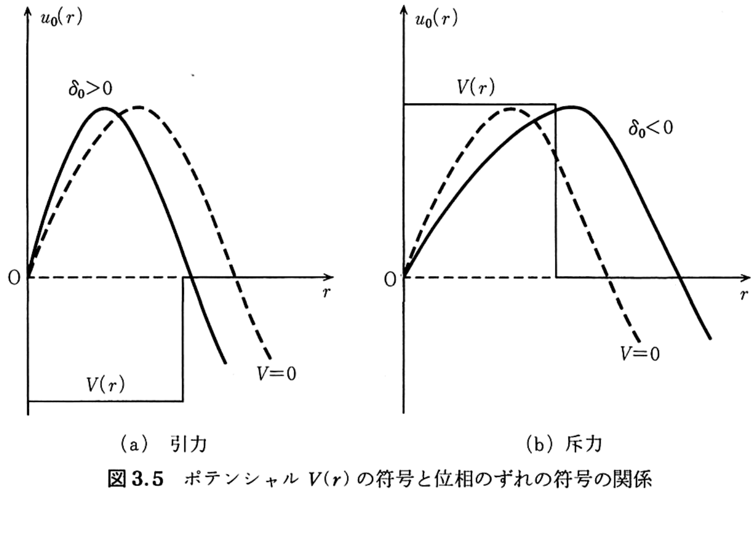
*　この解は，$r\to 0$ で $\sqrt{r}\psi\sim\sin\kappa r/\sqrt{r}\sim\kappa\sqrt{r}$ であるから，(5.47)の条件だけでなく，p.107の脚注で注意した $\sqrt{r}\psi|_{r\to 0}=0$ の条件もみたしている．

を用いると，全断面積は

$$\sigma^{\mathrm{tot}}=\frac{4\pi}{k^2}\cdot\frac{\sin^2 ka[ka\cot ka-\kappa a\cot\kappa a]^2}{(ka)^2+(\kappa a)^2\cot^2\kappa a} \tag{5.59}$$

で与えられる．

ここで，ポテンシャル $V(r)$ の符号と位相のずれの符号の関係を調べておこう．$V(r)$ が引力で $U_0>0$ のときに，内部の波動関数 $u_0^{\mathrm{in}}(r)=B\sin\kappa r$ を，$V(r)=0$ のときの解 $B\sin kr$ と比較すると，$\kappa=\sqrt{U_0+k^2}>k$ であるから，ポテンシャル内の波の波長は，$V=0$ のときの波長よりも短くなっている．そのため，ポテンシャル内の波動関数は，図3.5(a)に示されるように，ポテンシャルのなかに引きこまれ，それが外部の波動関数 $u_0^{\mathrm{ex}}(r)=A\sin(kr+\delta_0)$ になめらかに接続している．したがってこのとき，外部の波動関数の位相は $V=0$ のときの位相よりも進んでいる．すなわち，$V(r)$ が引力のとき，位相のずれ δ_0 は正である．逆に，ポテンシャル $V(r)$ が斥力で $U_0<0$ のときは，内部の波の波長は $V=0$ のときの波長よりも長くなり，図3.5(b)に示されているように，斥力ポテンシャルによって波動は外に押し出される．したがって，外部の波の位相は遅れて，$\delta_0<0$ となる．すなわち，$V(r)$ が斥力のとき，位相のずれ δ_0 は負になる．



(a)　引力　　　(b)　斥力

図3.5　ポテンシャル $V(r)$ の符号と位相のずれの符号の関係

最後に，低エネルギーの極限 $k\to 0$ のときを考えよう．(5.54)の第1式を(5.51)に代入すると

$$u_0^{\mathrm{ex}}(r) = \mathrm{e}^{i\delta_0}\cos\delta_0\left[\frac{\sin kr}{k}+\frac{\tan\delta_0}{k}\cdot\cos kr\right]$$

となる．ここで $k\to 0$ の極限をとると

$$u_0^{\mathrm{ex}}(r) = \mathrm{const.}\left[r+\lim_{k\to 0}(\tan\delta_0/k)\right] \tag{5.60}$$

である．そこで**散乱の長さ**(scattering length)というものを

$$\alpha \equiv -\lim_{k\to 0}\frac{\tan\delta_0}{k} \tag{5.61}$$

で定義すると，(5.60)は

$$u_0^{\mathrm{ex}}(r) = \mathrm{const.}(r-\alpha) \tag{5.62}$$

と表わされる．

一方，$k\to 0$ の極限における(5.57)の左辺を $F\equiv\sqrt{U_0}a\cot(\sqrt{U_0}a)$ とおくと，(5.58)より

$$\tan\delta_0 = \frac{ka\cot ka-F}{ka+\cot ka\cdot F}\xrightarrow[k\to 0]{} -ka\left[1-\frac{1}{F}\right]$$

であり，これを(5.61)に代入すると，散乱の長さは

$$\alpha = +a[1-1/F] \tag{5.63}$$

で与えられる．したがって，δ_0 が小さいとき

$$\delta_0 \cong -k\alpha$$

である．散乱振幅を α で表わすと

$$f = \frac{1}{k}\mathrm{e}^{i\delta_0}\sin\delta_0 = -\frac{1}{k}\mathrm{e}^{-ik\alpha}\sin k\alpha \xrightarrow[k\to 0]{} -\alpha. \tag{5.64}$$

また，$k\to 0$ の極限で全断面積(5.59)は，散乱の長さを用いて

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = 4\pi a^2\left[1-\frac{\tan\sqrt{U_0}\,a}{\sqrt{U_0}\,a}\right]^2 = 4\pi a^2\left[1-\frac{1}{F}\right]^2 = 4\pi\alpha^2 \tag{5.65}$$

と表わされる．

問 28 Rayleigh の公式(5.34)を証明せよ．

問 29 低エネルギー粒子の s 波の散乱において，半径 a の球状ポテンシャルの内部

の形が不明のとき，内部の波動関数の $r=a$ における対数微分 $(a\,\mathrm{d}u^{\mathrm{in}}/\mathrm{d}r)/u^{\mathrm{in}}|_{r=a}$ の値を β とすると，散乱の全断面積は

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = \frac{\pi}{k^2}\left|\frac{2ika}{\beta - ika} + 1 - \mathrm{e}^{2ika}\right|^2$$

で与えられることを示せ．上の結果を利用して，ポテンシャルの高さが無限大で，標的粒子を剛体とみなせるとき，低エネルギーの極限で全断面積は $4\pi a^2$ となることを示せ．

第4章

角運動量とスピン

§1 スピン角運動量

原子から放射される光のスペクトルを詳しく調べると，これまで述べてきた量子力学では説明できない多重性をもつことが知られている．例えば，Na の D 線は約 6 Å の間隔をもつ 2 重項からなっている．1925 年，Uhlenbeck と Goudsmit は，電子は大きさをもち，それが自転していて，その自転の角運動量の大きさが $\hbar/2$ であると仮定することによって，この問題を解決することに成功した*．これを電子の**スピン角運動量**という．しかし仮に，電子が古典電子半径 $r_e=\lambda_c\cdot\alpha$ の剛体球であるとすると，その中心軸のまわりの角運動量の大きさは $r_e m v$ の程度である．ここで v は剛体球の表面の回転速度である．この角運動量の大きさが $\hbar/2$ に等しいとすると，回転速度 v の値は，超光速 $v\sim c/\alpha=137c$ となり，これでは特殊相対論と矛盾してしまう．したがって，電子のスピン角運動量を古典的描像にもとづいて，電子の自転による角運動量と解釈することはできない．そこで Pauli は，スピン角運動量に対するこのような描像を捨てて，第 3 章 § 2 で説明したように，一般の角運動量 $\hbar\boldsymbol{J}$ の場合には，その固有値として半整数の値が許されることに注目し，これをスピン角運動量としたのである．以下では，このような考え方にもとづいて，スピン角運動量の性質を調べる．なお，このスピン角運動量を用いて，異常 Zeeman 効果などの現象を説明するには，電子の軌道角運動量を $\boldsymbol{L}$，そのスピン角運動量を $\boldsymbol{s}$ としたとき，電子の磁気双極子モーメントが

$$\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{m}}=\frac{e}{2m}(\boldsymbol{L}+2\boldsymbol{s}) \tag{1.1}$$

---

* このあたりの詳しい事情に関しては，朝永振一郎「スピンはめぐる」中央公論社(1974)を参照．

で与えられると仮定する必要がある．すなわち，$\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{m}}$ のスピンからくる項は，古典電磁気学から予想される値のほぼ2倍である*．この因子が現われる原因は，Dirac による相対論的電子論によってはじめて明らかにされた．

さて，第3章§2で述べたように，一般化された角運動量 $\hbar\boldsymbol{J}$ は，交換関係

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hat{J}_y \tag{1.2}$$

をみたす演算子として定義され，それらはまた

$$[\hat{J}_x, \hat{\boldsymbol{J}}^2] = [\hat{J}_y, \hat{\boldsymbol{J}}^2] = [\hat{J}_z, \hat{\boldsymbol{J}}^2] = 0 \tag{1.3}$$

をみたしている．そこで，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有状態をとり，それを $|j, m\rangle$ と書くと

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j, m\rangle = j(j+1)|j, m\rangle, \quad \hat{J}_z|j, m\rangle = m|j, m\rangle \tag{1.4}$$

である．ここで量子数 j のとる値は

$$j = 0,\ 1/2,\ 1,\ 3/2,\ 2,\ \cdots \tag{1.5}$$

であり，j の値を与えたとき，m のとる値は

$$m = j,\ j-1,\ \cdots,\ -j+1,\ -j \tag{1.6}$$

の $(2j+1)$ 個である．

また，昇降演算子を

$$\hat{J}^{(+)} \equiv \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad \hat{J}^{(-)} \equiv \hat{J}_x - i\hat{J}_y \tag{1.7}$$

と定義すると

$$\begin{aligned} \hat{J}^{(+)}|j, m\rangle &= \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,|j, m+1\rangle, \\ \hat{J}^{(-)}|j, m\rangle &= \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|j, m-1\rangle \end{aligned} \tag{1.8}$$

が成立する．

ここではじめ，$j=1/2$ のときを考えよう．これは，電子のスピン角運動量を記述する．このとき，$m=1/2$ と $-1/2$ が可能であるから，$|1/2,\ 1/2\rangle \equiv |+\rangle$，$|1/2,\ -1/2\rangle \equiv |-\rangle$ と書くと，$\hat{J}_z$ の行列要素は(1.4)の第2式から

$$\begin{aligned} \langle + |\hat{J}_z| + \rangle &= (1/2)\langle + | + \rangle = 1/2, \\ \langle + |\hat{J}_z| - \rangle &= (-1/2)\langle + | - \rangle = 0, \\ \langle - |\hat{J}_z| + \rangle &= (1/2)\langle - | + \rangle = 0, \\ \langle - |\hat{J}_z| - \rangle &= (-1/2)\langle - | - \rangle = -1/2 \end{aligned}$$

＊　なお，この2からの微小なずれを電子の異常磁気双極子モーメントといい，これもまた相対論的場の理論によって説明されている．

で与えられる．これらの行列要素からなる行列は

$$J_z \equiv \begin{pmatrix} \langle + | \hat{J}_z | + \rangle & \langle + | \hat{J}_z | - \rangle \\ \langle - | \hat{J}_z | + \rangle & \langle - | \hat{J}_z | - \rangle \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.9}$$

と表わされる．

スピンをもつ粒子の状態ベクトル $|\psi\rangle$ は，位置 $\hat{\boldsymbol{r}}$ と $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ および $\hat{J}_z$ の演算子の固有値により完全に記述されるから，j の値を固定したとき，$|\psi\rangle$ の位置・スピン表示は $\langle \boldsymbol{r}, m | \psi \rangle = \psi(\boldsymbol{r}, m)$ で表わされる．そこで $\langle \boldsymbol{r}, 1/2 | \psi \rangle = \psi(\boldsymbol{r}, +)$，$\langle \boldsymbol{r}, -1/2 | \psi \rangle = \psi(\boldsymbol{r}, -)$ と書くと，任意の状態関数は 1 行 2 列の行列

$$\begin{pmatrix} \langle \boldsymbol{r}, 1/2 | \psi \rangle \\ \langle \boldsymbol{r}, -1/2 | \psi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(\boldsymbol{r}, +) \\ \psi(\boldsymbol{r}, -) \end{pmatrix} = \psi(\boldsymbol{r}, +)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi(\boldsymbol{r}, -)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{1.10}$$

で表わされる．このとき，規格化の条件は

$$(\psi^*(\boldsymbol{r}, +), \psi^*(\boldsymbol{r}, -))\begin{pmatrix} \psi(\boldsymbol{r}, +) \\ \psi(\boldsymbol{r}, -) \end{pmatrix} = \psi^*(\boldsymbol{r}, +)\psi(\boldsymbol{r}, +) + \psi^*(\boldsymbol{r}, -)\psi(\boldsymbol{r}, -)$$

より，

$$\int_{-\infty}^{\infty} [\,|\psi(\boldsymbol{r}, +)|^2 + |\psi(\boldsymbol{r}, -)|^2] \mathrm{d}^3 r = 1 \tag{1.11}$$

で与えられる．なお

$$\alpha = \begin{pmatrix} \langle + | + \rangle \\ \langle - | + \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad \beta = \begin{pmatrix} \langle + | - \rangle \\ \langle - | - \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \tag{1.12}$$

と書き，(1.10)を次のように表わすこともある．

$$\begin{pmatrix} \psi(\boldsymbol{r}, +) \\ \psi(\boldsymbol{r}, -) \end{pmatrix} = \psi(\boldsymbol{r}, +)\alpha + \psi(\boldsymbol{r}, -)\beta. \tag{1.13}$$

さて，(1.9)から

$$\begin{aligned} J_z\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = +\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ J_z\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{1.14}$$

であるから，(1.12)の 1 行 2 列の行列 α と β とは，それぞれ行列 J_z の固有値 $+1/2$ と $-1/2$ に属する固有状態になっている．そこで固有状態 α をスピン上向きの状態，固有状態 β をスピン下向きの状態という．

次に，$\hat{J}_x$ と $\hat{J}_y$ の行列表示を求めておこう．(1.8)より

$$\hat{J}^{(+)}|+\rangle = 0,\quad \hat{J}^{(+)}|-\rangle = |+\rangle,\quad \hat{J}^{(-)}|+\rangle = |-\rangle,\quad \hat{J}^{(-)}|-\rangle = 0$$

であり，また，$\hat{J}_x=(1/2)(\hat{J}^{(+)}+\hat{J}^{(-)})$ であるから

$$\begin{aligned}
\langle +|\hat{J}_x|+\rangle &= (1/2)\langle +|\hat{J}^{(-)}|+\rangle = (1/2)\langle +|-\rangle = 0,\\
\langle +|\hat{J}_x|-\rangle &= (1/2)\langle +|\hat{J}^{(+)}|-\rangle = (1/2)\langle +|+\rangle = 1/2,\\
\langle -|\hat{J}_x|+\rangle &= (1/2)\langle -|\hat{J}^{(-)}|+\rangle = (1/2)\langle -|-\rangle = 1/2,\\
\langle -|\hat{J}_x|-\rangle &= (1/2)\langle -|\hat{J}^{(+)}|-\rangle = (1/2)\langle -|+\rangle = 0
\end{aligned}$$

である．したがって，$\hat{J}_x$ の行列表示は

$$J_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{1.15}$$

同様にして

$$J_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \tag{1.16}$$

となる．すなわち，スピン角運動量の z 成分 $s_z=\hbar J_z$ の固有値は $\hbar/2$, $-\hbar/2$ の2個であり，また，$\hat{\boldsymbol{s}}^2=\hbar^2\hat{\boldsymbol{J}}^2=\hbar^2(\hat{J}_x{}^2+\hat{J}_y{}^2+\hat{J}_z{}^2)$ の行列は

$$\boldsymbol{s}^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)\hbar^2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{1.17}$$

で与えられる．

なお，(1.9)，(1.15)および(1.16)の2行2列の行列

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{1.18}$$

を **Pauli のスピン行列**という．これらの行列が交換関係

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z,\quad [\sigma_y, \sigma_z] = 2i\sigma_x,\quad [\sigma_z, \sigma_x] = 2i\sigma_y \tag{1.19}$$

をみたし，また

$$\begin{aligned}
&\sigma_x{}^2 = \sigma_y{}^2 = \sigma_z{}^2 = 1,\\
&\sigma_x\sigma_y = i\sigma_z,\quad \sigma_y\sigma_z = i\sigma_x,\quad \sigma_z\sigma_x = i\sigma_y,\\
&\sigma_x\sigma_y+\sigma_y\sigma_x = \sigma_y\sigma_z+\sigma_z\sigma_y = \sigma_z\sigma_x+\sigma_x\sigma_z = 0
\end{aligned} \tag{1.20}$$

であることは，(1.18)を用いて直接たしかめることができる．

全く同様の手続きにより，$j=1$，すなわちスピン1のときの角運動量の行列表示は

$$J_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix},$$
$$J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{J}^2 = 2\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{1.21}$$

であり，また $j=3/2$，すなわちスピン 3/2 の行列表示は

$$J_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{3} & 0 & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix}, \quad J_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{3}i & 0 & 0 \\ \sqrt{3}i & 0 & -2i & 0 \\ 0 & 2i & 0 & -\sqrt{3}i \\ 0 & 0 & \sqrt{3}i & 0 \end{pmatrix},$$
$$J_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{J}^2 = \frac{15}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{1.22}$$

である．

問 30　スピン 1 の場合の角運動量の行列表示が(1.21)で与えられることを示せ．

§2　座標系の回転と角運動量

第 2 章§6 で述べたように，運動量という物理量は座標系の平行なずらしに関係する物理量であった．角運動量は座標原点 O のまわりの回転に関係をもつ物理量である．なお，この種の問題を論ずるとき，座標系は変えずに物理系そのものを回転する考え方と，物理系は動かさずに座標系を回転させる考え方とがあるが，それらの二つの方法は回転角の符号を反対にすれば全く等価である．ここでは一貫して，後者の座標系を回転する方法を採用する．

(1)　座標系の回転

いま，原点 O を中心とする中心力ポテンシャル $V(r)$ の作用のもとにある質量 m の粒子の固有値方程式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi(\boldsymbol{r}) + V(r)\psi(\boldsymbol{r}) = E\psi(\boldsymbol{r}) \tag{2.1}$$

を考える．カーテシアン座標系 (x, y, z) をとり，これをまとめて q と表わすこ

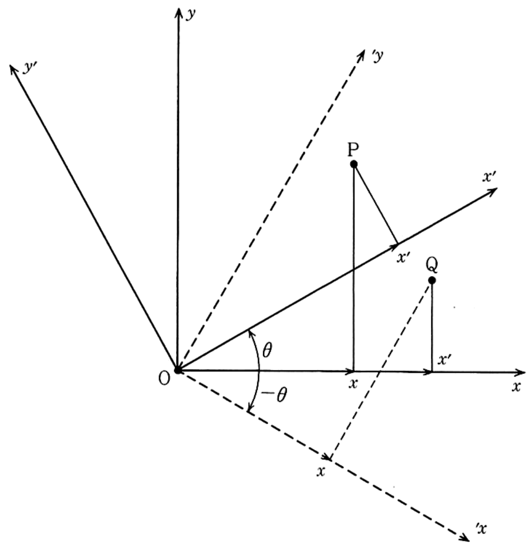


図 4.1　座標系の回転

とにする．ここで，座標系 (x,y,z) を，図 4.1 に示すように，z 軸のまわりに角度 θ だけ回転して，新座標系 $q'\equiv(x',y',z')$ に変換する．このとき，ある固定点 P のそれぞれの座標系での座標値 $q=(x,y,z)$ と $q'=(x',y',z')$ の間には

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{2.2}$$

の関係がある．このような変換を一般に

$$q \longrightarrow q' = Rq, \tag{2.3}$$

その逆変換を

$$q = R^{-1}q' \tag{2.4}$$

と書くことにする．もちろんこのとき，R は(2.2)のような 3 行 3 列の行列である．

(2.3)の座標変換に伴って，(2.1)の方程式は次のように変換される．

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle'\psi(R^{-1}q') + V(r')\psi(R^{-1}q') = E\psi(R^{-1}q'). \tag{2.5}$$

このとき，$r'=r$ より $V(r')=V(r)$，またラプラシアンについても $\triangle'=\triangle$ であることを用いている．いま $\psi(R^{-1}q')$ を q' の関数とみて，$\psi'(q')=\psi(R^{-1}q')$ と表わす．左側の ψ' は変数の書きかえに伴う関数形の変化を示すものである．これを(2.5)に代入して，変数 q' のダッシを除くと

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\psi'(q)+V(r)\psi'(q) = E\psi'(q) \tag{2.6}$$

となる．すなわち，ハミルトニアン H の形が座標系の回転に対して不変のとき，$H\psi(q)=E\psi(q)$ なら，$H\psi'(q)=E\psi'(q)$ も成立する．したがってこのとき，エネルギーの固有関数には縮退が存在する．

上に述べたように，座標変換 $q'=Rq$ に伴って，状態関数 $\psi(q)$ は

$$\psi(q) = \psi(R^{-1}q') = \psi'(q') \tag{2.7}$$

と変化する．右側の ψ' の右肩のダッシは，q の関数 $\psi(q)$ を新変数 q' ($=Rq$) で表わしたことによって生じる関数形の変化を示すものである．また(2.7)の q' と q とは，空間内の同一点 P の新旧座標系での座標値である．そこで，座標変換による関数形の変化，つまり状態の変化に注目して，旧座標系 (x, y, z) での座標値が q' の点，すなわち図 4.1 の Q 点における状態関数 $\psi(q')$ を，(2.7)の $\psi'(q')$ に変換するユニタリー演算子 U を導入して

$$\psi'(q'\leftarrow\mathrm{P}) = U\psi(q'\leftarrow\mathrm{Q}) \tag{2.8}$$

とする．ここで(2.8)の左右の状態関数の座標の値 q' は同一であるが，それらが空間内の別の点 P と Q の位置座標であることを明確にするために，(2.8)のように表わしている．そこで(2.7)と(2.8)を組み合わせると

$$\psi(q\leftarrow\mathrm{P}) = \psi(R^{-1}q'\leftarrow\mathrm{P}) = \psi'(q'\leftarrow\mathrm{P}) = U\psi(q'\leftarrow\mathrm{Q}) \tag{2.9}$$

である．この式の両端から

$$\psi(q'\leftarrow\mathrm{Q}) = U^{-1}\psi(q\leftarrow\mathrm{P}). \tag{2.10}$$

一方，

$$\psi(q'\leftarrow\mathrm{Q}) = \psi(Rq\leftarrow\mathrm{Q}) = {}'\psi(q\leftarrow\mathrm{Q}) \tag{2.11}$$

である．この2番目の等号は，q' ($=Rq$) の関数を q の関数としたことによる関数形の変化を表わしている．このとき，上の座標変換 $q'=Rq$ は，図 4.1 に示したように，旧座標系 (x, y, z) における点 Q の座標値 q' と，旧座標系を逆に角 $-\theta$ だけ回転した(図の点線で示す)座標系 $('x, 'y, 'z)$ からみた同じ Q 点の

座標値 q の間を結ぶ変換である．(2.10)と(2.11)から

$$'\psi(q\leftarrow \mathrm{Q}) = U^{-1}\psi(q\leftarrow \mathrm{P}) \tag{2.12}$$

である．(2.8)が座標系 (x, y, z) から座標系 (x', y', z') への変換に伴う状態関数の形の変化を与えているのに対して，(2.12)は座標系 (x, y, z) から，(2.8)のときとは反対向きの回転によりえられる座標系 $('x, 'y, 'z)$ への変換に伴う状態関数の形の変化を与えるものである．そして，その変換は(2.8)の U の逆演算子 U^{-1} で与えられることに注意しよう．

ここで(2.8)の変数 q' を q に書きかえ，(2.8)と(2.12)をもういちど書くと

$$\psi'(q) = U\psi(q), \quad '\psi(q) = U^{-1}\psi(q) \tag{2.13}$$

である．これらは位置表示で表わした状態関数の変換を与える表式である．そこで $\psi(q)=\langle q|\psi\rangle$，$\psi'(q)=\langle q|\psi'\rangle$，また $'\psi(q)=\langle q|'\psi\rangle$ とおき，Dirac の記法を用いると，(2.13)は

$$|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle, \quad |'\psi\rangle = \hat{U}^{-1}|\psi\rangle \tag{2.14}$$

となる．さて，座標変換による状態の変化に伴って，任意のオブザーバブル $\hat{O}$ はどのように変換されるだろうか．任意の状態 $|\psi\rangle$ に $\hat{O}$ を作用させたとき，$\hat{O}|\psi\rangle$ もまた一つの状態を表わしている．したがって，座標変換 $\hat{U}$ に伴って，$\hat{O}|\psi\rangle$ もまた $\hat{U}\hat{O}|\psi\rangle$ に変換される．すなわち

$$\hat{U}(\hat{O}|\psi\rangle) = \hat{U}\hat{O}\hat{U}^{-1}\hat{U}|\psi\rangle = \hat{U}\hat{O}\hat{U}^{-1}|\psi'\rangle = '\hat{O}|\psi'\rangle$$

である．ここで

$$'\hat{O} = \hat{U}\hat{O}\hat{U}^{-1} \tag{2.15}$$

とおいた．これが座標変換に伴う演算子の変換式である．このとき

$$\langle\psi'|'\hat{O}|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^{-1}\cdot\hat{U}\hat{O}\hat{U}^{-1}\cdot\hat{U}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$$

である．

一方，演算子 $\hat{O}$ の新座標系 (x', y', z') からみた期待値は $\bar{O}'\equiv\langle\psi'|\hat{O}|\psi'\rangle$ で与えられ，同じ演算子 $\hat{O}$ を旧座標系で観測したときの期待値は $\bar{O}\equiv\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$ である*．これらの期待値の間の変換性が

$$\bar{O}' = S\bar{O} \tag{2.16}$$

---

* 座標変換に伴って，状態ベクトルが変化し，演算子は変わらないとするこの立場は，状態ベクトルが時間的に変化し，演算子は一定に保たれるとする Schrödinger 表示の理論に相当する．これに対して，(2.17)は Heisenberg 表示に対応する．

であるとする．このとき

$$\langle\psi'|\hat{O}|\psi'\rangle = \langle\psi|\hat{U}^{-1}\hat{O}\hat{U}|\psi\rangle = S\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$$

である．ここで状態ベクトル $|\psi\rangle$ が任意であることに注意し，$\hat{O}'\equiv\hat{U}^{-1}\hat{O}\hat{U}$ とおくと

$$\hat{O}' = \hat{U}^{-1}\hat{O}\hat{U} = S\hat{O} \tag{2.17}$$

となる．すなわち，座標変換に伴う物理量の期待値の変換の原因を，演算子の変化に押しつけるとき，演算子は(2.17)により変換される．(2.17)と(2.15)の変換がたがいに逆変換になっていることに注意されたい．

(2.17)の変換係数 S が(2.3)の R と同じものであるとき，$\hat{O}$ を**ベクトル演算子**という．また，$S=1$ のとき，$\hat{O}$ を**スカラー演算子**という．このときには，$\hat{O}'=\hat{U}^{-1}\hat{O}\hat{U}=\hat{O}$ となり，$[\hat{O},\hat{U}]=0$ である．系のハミルトニアン $\hat{H}$ の形が座標変換に対して不変であり，したがって $\hat{H}$ がスカラー演算子のとき，上で $\hat{O}=\hat{H}$ とおけば

$$[\hat{H},\hat{U}] = 0 \tag{2.18}$$

をえる．これより，$\hat{U}$ が時間的に保存することが結論される．すぐ後で示すように，座標の回転をもたらす演算子 $\hat{U}$ は角運動量演算子で表わされるので，(2.18)は，$\hat{H}$ が座標回転に対して不変なとき，角運動量が保存することを示すものである．

(2.15)と(2.17)を比較すると

$$'\hat{O} = \hat{U}\hat{O}\hat{U}^{-1} = S^{-1}\hat{O} \tag{2.19}$$

である．これは(2.15)の変換が，(2.17)の逆向きの変換であることを示している．なおこのとき，期待値に関して

$$\langle'\psi|\hat{O}'|'\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}\hat{O}'\hat{U}^{-1}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}\cdot\hat{U}^{-1}\hat{O}\hat{U}\cdot\hat{U}^{-1}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$$

であり，また

$$\langle\psi|'\hat{O}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{U}\hat{O}\hat{U}^{-1}|\psi\rangle = \langle'\psi|\hat{O}|'\psi\rangle = S^{-1}\langle\psi|\hat{O}|\psi\rangle$$

であることを注意しておく．

(2) Euler 角

(2.2)では，座標変換として z 軸のまわりの回転を考えた．ここで，x, y, z 軸のそれぞれの軸のまわりの角 θ の回転を与える変換行列をまとめて示しておくと，

$$R_x(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & \sin\theta \\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}, \qquad R_y(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{pmatrix},$$

$$R_z(\theta) = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.20}$$

である．ここで，任意の座標回転を記述するのに便利な **Euler 角** (α, β, γ) を利用する方法について説明しておく．この方法は，次の3回の座標回転を順次に行うことにより，一般の座標回転を記述するものである．それはまず座標系 $q=(x, y, z)$ を，z 軸のまわりの角 α の回転により，座標系 $q'=(x', y', z'=z)$ に変換する．すなわち，

$$q' = R_z(\alpha)q$$

とする．次に座標系 $q'=(x', y', z')$ を，新しい y' 軸のまわりに角 β の回転により，座標系 $q''=(x'', y''=y', z'')$ に変換する．すなわち

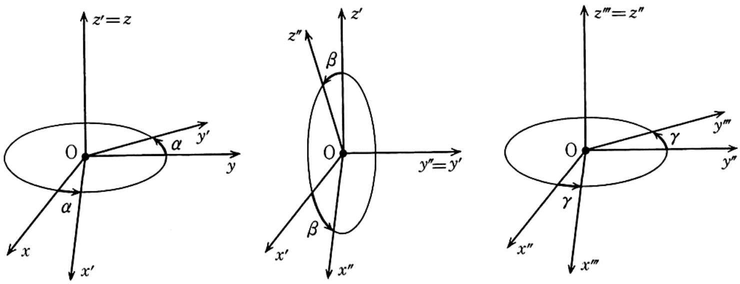
$$q'' = R_{y'}(\beta)q',$$

最後に，座標系 $q''=(x'', y'', z'')$ を z'' 軸のまわりに角 γ だけ回転して，座標系 $q'''=(x''', y''', z'''=z'')$ に移す．このとき

$$q''' = R_{z''}(\gamma)q''$$

である．図4.2は，この3回の座標変換の手続きを図示したものである．上の3回の変換を順序通りに結合すると

$$q''' = R_{z''}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha)q \tag{2.21}$$



(1)　$R_z(\alpha)$　　(2)　$R_{y'}(\beta)$　　(3)　$R_{z''}(\gamma)$

図4.2　Euler 角

である．これに(2.20)を代入して，行列の積を求めると

$$R(\alpha,\beta,\gamma) \equiv R_{z''}(\gamma)R_{y'}(\beta)R_z(\alpha)$$
$$= \begin{pmatrix} \cos\gamma\cos\beta\cos\alpha-\sin\gamma\sin\alpha & \cos\gamma\cos\beta\sin\alpha+\sin\gamma\cos\alpha & -\cos\gamma\sin\beta \\ -\sin\gamma\cos\beta\cos\alpha-\cos\gamma\sin\alpha & -\sin\gamma\cos\beta\sin\alpha+\cos\gamma\cos\alpha & +\sin\gamma\sin\beta \\ \sin\beta\cos\alpha & \sin\beta\sin\alpha & \cos\beta \end{pmatrix} \tag{2.22}$$

がえられる．

(3) 軌道角運動量

座標系の回転に伴う状態関数の変化を与えるユニタリー演算子 U の具体的な形を求めるのに，(2.7)と(2.8)を結合した

$$\psi(q) = \psi(R^{-1}q') = U\psi(q') \tag{2.23}$$

を用いる方法と，(2.10)と(2.11)からえられる

$$\psi(q') = \psi(Rq) = U^{-1}\psi(q) \tag{2.24}$$

を利用する方法がある．(2.2)のような同一軸のまわりの座標回転や，座標系の平行移動のときのように，順次に行った変換が交換可能のときには，(2.23)と(2.24)のどちらを利用してもよいが，上の Euler 角を用いた変換のように，交換不能な2回以上の座標回転を行うときには，(2.24)を用いたほうが考えやすい．なぜなら，1番目の回転を $q'=R_1q$，2番目の回転を $q''=R_2q'$ とすると，(2.23)の場合には，$\psi(q)=U_1\psi(q')$，$\psi(q')=U_2\psi(q'')$ より，$\psi(q)=U_1U_2\psi(q'')$ となる．すなわち

$$\psi(R_1{}^{-1}R_2{}^{-1}q'') = U_1U_2\psi(q'') \tag{2.25}$$

である．これに対して(2.24)の場合は，$\psi(q')=U_1{}^{-1}\psi(q)$，$\psi(q'')=U_2{}^{-1}\psi(q')$ を結合すると，$\psi(q'')=U_2{}^{-1}U_1{}^{-1}\psi(q)$ より

$$\psi(R_2R_1q) = U_2{}^{-1}U_1{}^{-1}\psi(q) \tag{2.26}$$

となる．すなわち，(2.25)のときには座標変換の順序 $R_1\to R_2$ と反対の順序で，すなわちまず状態関数を $U_2\psi$ と変換し，次に $U_1\cdot U_2\psi$ と変換しなければならない．これに対して(2.26)の場合には，変換の順序通りに，$U_2{}^{-1}\cdot U_1{}^{-1}\psi(q)$ とすればよいからである．

そこで(2.24)を用いて，ユニタリー演算子 U を決定しよう．まず，x 軸のまわりの無限小角 ε の回転を考えると，(2.20)より座標変換は，ε の1次の程

度で

$$x' = x, \quad y' = y+\varepsilon z, \quad z' = z-\varepsilon y \tag{2.27}$$

で与えられる．この変換に伴って，(2.24)により

$$\begin{aligned} U_x^{-1}(\varepsilon)\psi(x,y,z) &= \psi(x',y',z') = \psi(x,y+\varepsilon z,z-\varepsilon y) \\ &= \psi(x,y,z)-\varepsilon\left(y\frac{\partial}{\partial z}-z\frac{\partial}{\partial y}\right)\psi(x,y,z) \\ &= [1-(i\varepsilon/\hbar)L_x]\psi(x,y,z). \end{aligned} \tag{2.28}$$

ここで $L_x=yp_z-zp_y$ は軌道角運動量演算子 $\boldsymbol{L}$ の x 成分である．(2.28)の左右を比較すると

$$U_x^{-1}(\varepsilon) = 1-(i\varepsilon/\hbar)L_x \tag{2.29}$$

である．ここで $\theta=n\varepsilon$ として，θ を有限に保ちながら，n 回の回転を重ねて，$n\to\infty$ の極限をとると，有限角 θ の回転に対するユニタリー演算子として

$$U_x^{-1}(\theta) = \lim_{n\to\infty}\left(1-\frac{i\theta}{n\hbar}L_x\right)^n = \mathrm{e}^{-i\theta L_x/\hbar} \tag{2.30}$$

がえられる．したがって，(2.13)より

$$'\psi(q) = U_x^{-1}(\theta)\psi(q) = \mathrm{e}^{-i\theta L_x/\hbar}\psi(q), \tag{2.31}$$

あるいはまた

$$\psi'(q) = U_x(\theta)\psi(q) = \mathrm{e}^{+i\theta L_x/\hbar}\psi(q) \tag{2.32}$$

と表わされる．すなわち，座標変換 $R_x(\theta)$ に伴う状態関数の変換を与えるユニタリー演算子 U_x は，軌道角運動量演算子の x 成分 L_x により，(2.32)で表わされる．

全く同様にして，y 軸のまわりの角 θ の回転に対しては，$U_y^{-1}(\theta)=\mathrm{e}^{-i\theta L_y/\hbar}$ であり，状態関数の変換は

$$\begin{aligned} '\psi(q) &= U_y^{-1}(\theta)\psi(q) = \mathrm{e}^{-i\theta L_y/\hbar}\psi(q), \\ \psi'(q) &= U_y(\theta)\psi(q) = \mathrm{e}^{i\theta L_y/\hbar}\psi(q) \end{aligned} \tag{2.33}$$

で与えられる．ここで $L_y=zp_x-xp_z$ である．また，z 軸のまわりの角 θ の回転のときは，$U_z^{-1}(\theta)=\mathrm{e}^{-i\theta L_z/\hbar}$ で，状態関数の変換は

$$\begin{aligned} '\psi(q) &= U_z^{-1}(\theta)\psi(q) = \mathrm{e}^{-i\theta L_z/\hbar}\psi(q), \\ \psi'(q) &= U_z(\theta)\psi(q) = \mathrm{e}^{i\theta L_z/\hbar}\psi(q) \end{aligned} \tag{2.34}$$

で表わされる．

一般の座標回転は，Euler 角を用いた(2.21)の3回つづきの回転によってえられる．そのとき，その順序が交換不能であることに注意する．まず，z 軸のまわりの角 α の回転によって，状態関数は

$$'\psi(q) = U_z^{-1}(\alpha)\psi(q) = \mathrm{e}^{-i\alpha L_z/\hbar}\psi(q)$$

と変換される．次いで，y' 軸のまわりの角 β の回転によって

$$''\psi(q) = U_{y'}^{-1}(\beta)\,'\psi(q) = \mathrm{e}^{-i\beta L_{y'}/\hbar}\,'\psi(q)$$
$$= \mathrm{e}^{-i\beta L_{y'}/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\alpha L_z/\hbar}\psi(q)$$

と変換される．このとき，$L_{y'}$ は y 軸ではなく，新しい y' 軸のまわりの角運動量であることに注意しよう．最後に，z'' 軸のまわりの角 γ の回転により

$$'''\psi(q) = U_{z''}^{-1}(\gamma)\,''\psi(q)$$
$$= \mathrm{e}^{-i\gamma L_{z''}/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\beta L_{y'}/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\alpha L_z/\hbar}\psi(q)$$

となる．したがって $'''\psi(q)=U^{-1}(\alpha,\beta,\gamma)\psi(q)$ と書くと

$$U^{-1}(\alpha,\beta,\gamma) = \mathrm{e}^{-i\gamma L_{z''}/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\beta L_{y'}/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\alpha L_z/\hbar} \tag{2.35}$$

と表わすことができる．なお，後の(2.49)で一般の角運動量の場合にその証明を与えるように，(2.35)は，最初の座標系 $q=(x,y,z)$ のそれぞれの座標軸のまわりの角運動量 L_y と L_z を用いて

$$U^{-1}(\alpha,\beta,\gamma) = \mathrm{e}^{-i\alpha L_z/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\beta L_y/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\gamma L_z/\hbar} \tag{2.36}$$

とすることができる．このような表現が可能な点が Euler 角を用いる利点である．また，右辺の3個の演算子の順序が(2.35)とは逆になっていることに注意しよう．ここで $q'''=(x''',y''',z''')$ を改めて $q'=(x',y',z')$ と書きかえると，

$$'\psi(q) = U^{-1}(\alpha,\beta,\gamma)\psi(q)$$
$$= \mathrm{e}^{-i\alpha L_z/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\beta L_y/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\gamma L_z/\hbar}\psi(q) \tag{2.37}$$

である．また $U(\alpha,\beta,\gamma)=\{U^{-1}(\alpha,\beta,\gamma)\}^\dagger$ を用いると

$$\psi'(q) = U(\alpha,\beta,\gamma)\psi(q)$$
$$= \mathrm{e}^{i\gamma L_z/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{i\beta L_y/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{i\alpha L_z/\hbar}\psi(q) \tag{2.38}$$

をえる．すなわち，座標系 $q=(x,y,z)$ における角運動量 $\boldsymbol{L}$ で $U(\alpha,\beta,\gamma)$ を表わすと，それは

$$\psi'(q) = \mathrm{e}^{i\alpha L_z/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{i\beta L_{y'}/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{i\gamma L_{z''}/\hbar}\psi(q)$$

とは逆に，Euler 角を用いた変換と同じ順序で変換される．

問 31 (2.17)の変換性にもとづいて，(2.38)で $\alpha=\varphi$, $\beta=\theta$, $\gamma=0$ とした $U(\varphi,\theta,0)$

により，$\boldsymbol{L}$ がベクトル演算子として変換することを示せ．

(4)　一般の角運動量

これまでは軌道角運動量を考えてきたが，ここで(1.2)の交換関係によって定義される一般の角運動量の場合を考えよう．このとき，x 軸のまわりの無限小角 ε の回転(2.27)に伴って，任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ がユニタリー演算子 $\hat{U}_x(\varepsilon)$ により

$$|'\psi\rangle = \hat{U}_x^{-1}(\varepsilon)|\psi\rangle \tag{2.39}$$

と変換されるものとする．ここで，任意のエルミート演算子 $\hat{J}_x$ を用いて

$$\hat{U}_x^{-1}(\varepsilon) = 1-i\varepsilon\hat{J}_x, \qquad \hat{U}_x(\varepsilon) = 1+i\varepsilon\hat{J}_x \tag{2.40}$$

とおけば，ユニタリー性の条件 $\hat{U}_x^{-1}(\varepsilon)\hat{U}_x(\varepsilon)=\hat{U}_x(\varepsilon)\hat{U}_x^{-1}(\varepsilon)=1$ が ε の1次の程度でみたされる．また，演算子 $\hat{J}_x$ は(2.27)の無限小回転のもとで，(2.17)および(2.27)にしたがってベクトル演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}$ の x 成分として変換することを要請する．すなわち

$$\begin{aligned}\hat{J}_{x'} &= \hat{U}_x^{-1}(\varepsilon)\hat{J}_x\hat{U}_x(\varepsilon) = \hat{J}_x,\\ \hat{J}_{y'} &= \hat{U}_x^{-1}(\varepsilon)\hat{J}_y\hat{U}_x(\varepsilon) = \hat{J}_y+\varepsilon\hat{J}_z,\\ \hat{J}_{z'} &= \hat{U}_x^{-1}(\varepsilon)\hat{J}_z\hat{U}_x(\varepsilon) = \hat{J}_z-\varepsilon\hat{J}_y\end{aligned} \tag{2.41}$$

と変換されると仮定する．そこで，(2.40)を(2.41)の表式に代入して，ε の1次の量を残すと，交換関係

$$[\hat{J}_x,\hat{J}_y] = i\hat{J}_z, \qquad [\hat{J}_z,\hat{J}_x] = i\hat{J}_y$$

をえる．同様に y 軸と z 軸のまわりの無限小回転を考えて，上と同様の仮定をすると，結局

$$[\hat{J}_x,\hat{J}_y] = i\hat{J}_z, \qquad [\hat{J}_y,\hat{J}_z] = i\hat{J}_x, \qquad [\hat{J}_z,\hat{J}_x] = i\hat{J}_y \tag{2.42}$$

がえられる．すなわち，エルミート演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}$ は一般の角運動量にほかならない．したがって，それぞれの座標軸のまわりの有限角 θ の回転に対応するユニタリー演算子は，それぞれ

$$\hat{U}_x(\theta) = \mathrm{e}^{i\theta\hat{J}_x}, \qquad \hat{U}_y(\theta) = \mathrm{e}^{i\theta\hat{J}_y}, \qquad \hat{U}_z(\theta) = \mathrm{e}^{i\theta\hat{J}_z} \tag{2.43}$$

で与えられる．

ここで Euler 角 (α,β,γ) を用いて一般の座標回転を表わした場合を考える．このとき，z 軸のまわりの角 α の回転により，状態ベクトルは

$$|'\psi\rangle = \hat{U}_z^{-1}(\alpha)|\psi\rangle = \mathrm{e}^{-i\alpha\hat{J}_z}|\psi\rangle$$

と変換し，次に新しいy'軸のまわりの角βの回転により

$$|''\psi\rangle = \hat{U}_{y'}^{-1}(\beta)|'\psi\rangle = \mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_{y'}}|'\psi\rangle$$
$$= \mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_{y'}}\cdot\mathrm{e}^{-i\alpha\hat{J}_z}|\psi\rangle$$

となり，最後に新しいz''軸のまわりの角γの回転により

$$|'''\psi\rangle = \hat{U}_{z''}^{-1}(\gamma)|''\psi\rangle = \mathrm{e}^{-i\gamma\hat{J}_{z''}}|''\psi\rangle$$
$$= \mathrm{e}^{-i\gamma\hat{J}_{z''}}\cdot\mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_{y'}}\cdot\mathrm{e}^{-i\alpha\hat{J}_z}|\psi\rangle \tag{2.44}$$

と変換される．したがって

$$\hat{U}^{-1}(\alpha,\beta,\gamma) = \mathrm{e}^{-i\gamma\hat{J}_{z''}}\cdot\mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_{y'}}\cdot\mathrm{e}^{-i\alpha\hat{J}_z} \tag{2.45}$$

である．

ここで，(2.45)を最初の座標系$q=(x,y,z)$の各軸のまわりの角運動量を用いて表わそう．(2.17)によると，演算子$\hat{O}$は，変換$\hat{U}$によって

$$\hat{O}' = \hat{U}^{-1}\hat{O}\hat{U} \tag{2.46}$$

により変換される．y'軸はy軸をz軸のまわりに角αの回転をしたものであるから，(2.43)と(2.46)により

$$\hat{J}_{y'} = \mathrm{e}^{-i\alpha\hat{J}_z}\hat{J}_y\mathrm{e}^{i\alpha\hat{J}_z}$$

である．したがって，

$$\mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_{y'}} = \mathrm{e}^{-i\alpha\hat{J}_z}\cdot\mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_y}\cdot\mathrm{e}^{i\alpha\hat{J}_z}$$

が成立する．これより

$$\mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_{y'}}\cdot\mathrm{e}^{-i\alpha\hat{J}_z} = \mathrm{e}^{-i\alpha\hat{J}_z}\cdot\mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_y} \tag{2.47}$$

をえる．また，z''軸はy'軸のまわりにz'軸を角βだけ回転したものであるから，(2.46)により

$$\hat{J}_{z''} = \mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_{y'}}\hat{J}_{z'}\mathrm{e}^{i\beta\hat{J}_{y'}} = \mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_{y'}}\hat{J}_z\mathrm{e}^{i\beta\hat{J}_{y'}}$$

である．このとき，z'軸はz軸に一致していることから$\hat{J}_{z'}=\hat{J}_z$であることを用いている．したがって

$$\mathrm{e}^{-i\gamma\hat{J}_{z''}} = \mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_{y'}}\cdot\mathrm{e}^{-i\gamma\hat{J}_z}\cdot\mathrm{e}^{i\beta\hat{J}_{y'}}$$

である．これより

$$\mathrm{e}^{-i\gamma\hat{J}_{z''}}\cdot\mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_{y'}} = \mathrm{e}^{-i\beta\hat{J}_{y'}}\cdot\mathrm{e}^{-i\gamma\hat{J}_z} \tag{2.48}$$

がえられる．(2.47)と(2.48)を用いると，(2.45)は次のように書き直すことができる．

$$\begin{aligned}\hat{U}^{-1}(\alpha,\beta,\gamma) &= e^{-i\gamma\hat{J}_{z''}}\cdot e^{-i\beta\hat{J}_{y'}}\cdot e^{-i\alpha\hat{J}_z}\\ &= e^{-i\beta\hat{J}_{y'}}\cdot e^{-i\gamma\hat{J}_z}\cdot e^{-i\alpha\hat{J}_z}\\ &= e^{-i\beta\hat{J}_{y'}}\cdot e^{-i\alpha\hat{J}_z}\cdot e^{-i\gamma\hat{J}_z}\\ &= e^{-i\alpha\hat{J}_z}\cdot e^{-i\beta\hat{J}_y}\cdot e^{-i\gamma\hat{J}_z}. \end{aligned} \tag{2.49}$$

ここで2番目の等号では(2.48)を，3番目の等号では第2と第3の因子の順序をいれかえ，最後の等号では(2.47)を用いている．(2.49)のエルミート共役をとると

$$\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma) = e^{i\gamma\hat{J}_z}\cdot e^{i\beta\hat{J}_y}\cdot e^{i\alpha\hat{J}_z} \tag{2.50}$$

をえる．こうして，ユリタリー演算子 $\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)$ を最初の座標系 $q=(x,y,z)$ の各軸のまわりの角運動量演算子 $\hat{\boldsymbol{J}}$ を用いて表わすことができた．ここで，$q'''=(x''',y''',z''')$ を $q'=(x',y',z')$ と書きかえると

$$|'\psi\rangle = \hat{U}^{-1}(\alpha,\beta,\gamma)|\psi\rangle = e^{-i\alpha\hat{J}_z}\cdot e^{-i\beta\hat{J}_y}\cdot e^{-i\gamma\hat{J}_z}|\psi\rangle$$

および

$$|\psi'\rangle = \hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)|\psi\rangle = e^{i\gamma\hat{J}_z}\cdot e^{i\beta\hat{J}_y}\cdot e^{i\alpha\hat{J}_z}|\psi\rangle \tag{2.51}$$

がえられる．このように最初の座標系での $\hat{\boldsymbol{J}}$ を用いることにより，(2.51)の変換 $\hat{U}(\alpha,\beta,\gamma)$ は座標の変換と同じ順序で状態ベクトルに作用する．

(5)　スピン 1/2

Pauli のスピン行列(1.18)を用いると，z 軸のまわりの角 θ の回転に対して

$$\begin{aligned}U_z(\theta) &= e^{i\theta J_z} = e^{i\theta\sigma_z/2} = \cos(\theta\sigma_z/2)+i\sin(\theta\sigma_z/2)\\ &= \cos(\theta/2)+i\sigma_z\sin(\theta/2)\\ &= \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\cos(\theta/2)+i\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\sin(\theta/2)\\ &= \begin{pmatrix}e^{i\theta/2} & 0\\ 0 & e^{-i\theta/2}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{2.52}$$

となる．ここで4番目の等号では，三角関数を θ のベキに展開して，$\sigma_z{}^2=1$ の性質を用いた．このとき，任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ は，$|\psi'\rangle=\hat{U}_z(\theta)|\psi\rangle$ と変換する．そこで

$$\begin{aligned}\langle +|\psi'\rangle &= \langle +|\hat{U}_z(\theta)|+\rangle\langle +|\psi\rangle+\langle +|\hat{U}_z(\theta)|-\rangle\langle -|\psi\rangle,\\ \langle -|\psi'\rangle &= \langle -|\hat{U}_z(\theta)|+\rangle\langle +|\psi\rangle+\langle -|\hat{U}_z(\theta)|-\rangle\langle -|\psi\rangle\end{aligned}$$

において，

$$\langle + | \psi' \rangle = C_+', \quad \langle - | \psi' \rangle = C_-', \quad \langle + | \psi \rangle = C_+, \quad \langle - | \psi \rangle = C_-$$

とおいて，(2.52)の行列表示を用いると

$$C_+' = \mathrm{e}^{i\theta/2} C_+, \qquad C_-' = \mathrm{e}^{-i\theta/2} C_- \tag{2.53}$$

となる．これが，z 軸のまわりの回転に対する状態関数の変換式である．

次に y 軸のまわりの角 θ の回転を考えると，(2.52)と同様にして

$$\begin{aligned} U_y(\theta) &= \mathrm{e}^{i\theta J_y} = \mathrm{e}^{i\theta\sigma_y/2} = \cos(\theta/2) + i\sigma_y \sin(\theta/2) \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cos(\theta/2) + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & \sin(\theta/2) \\ -\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

となる．このとき，任意の状態関数の変換式は

$$\begin{aligned} C_+' &= \cos(\theta/2) C_+ + \sin(\theta/2) C_-, \\ C_-' &= -\sin(\theta/2) C_+ + \cos(\theta/2) C_- \end{aligned} \tag{2.54}$$

で与えられる．全く同様にして，x 軸のまわりの角 θ の回転により

$$U_x(\theta) = \mathrm{e}^{i\theta J_x} = \mathrm{e}^{i\theta\sigma_x/2} = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & i\sin(\theta/2) \\ i\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix} \tag{2.55}$$

であり，任意の状態関数の変換式は

$$\begin{aligned} C_+' &= \cos(\theta/2) C_+ + i\sin(\theta/2) C_-, \\ C_-' &= i\sin(\theta/2) C_+ + \cos(\theta/2) C_- \end{aligned} \tag{2.56}$$

で表わされる．(2.53),(2.54)および(2.56)の変換式をみると，座標系をそれぞれの軸のまわりに 1 回転($\theta=2\pi$)しても元にもどらず，2 回転($\theta=4\pi$)してはじめて，$C_+'=C_+$, $C_-'=C_-$ となる．このような変換性を示す量をスピノルという．

Euler 角 (α, β, γ) を用いた一般の変換に対しては，(2.50)より

$$\begin{aligned} U(\alpha,\beta,\gamma) &= \mathrm{e}^{i\gamma\sigma_z/2} \cdot \mathrm{e}^{i\beta\sigma_y/2} \cdot \mathrm{e}^{i\alpha\sigma_z/2} \\ &= \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{i\gamma/2} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-i\gamma/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & \sin(\beta/2) \\ -\sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & \mathrm{e}^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(\beta/2)\mathrm{e}^{i(\alpha+\gamma)/2} & \sin(\beta/2)\mathrm{e}^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ -\sin(\beta/2)\mathrm{e}^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos(\beta/2)\mathrm{e}^{-i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.57}$$

である．このとき，状態関数の変換式は

$$C_+' = \cos(\beta/2)e^{i(\alpha+\gamma)/2}C_+ + \sin(\beta/2)e^{-i(\alpha-\gamma)/2}C_-,$$
$$C_-' = -\sin(\beta/2)e^{i(\alpha-\gamma)/2}C_+ + \cos(\beta/2)e^{-i(\alpha+\gamma)/2}C_- \quad (2.58)$$

で与えられる．

問32　x, y, z 軸のそれぞれの座標軸のまわりの回転に対して，Pauli のスピン行列 σ_x, σ_y および σ_z がベクトル演算子として変換することを確かめよ．

問33　スピンが，第3章の図3.1の動径ベクトル $\boldsymbol{r}$ の方向 (θ, φ) を向いているとき，図の z 軸の正負の方向にスピンを発見する確率を求めよ．

(6)　スピン-軌道相互作用

Bohr の原子模型によると，水素原子内の電子は陽子のまわりを回転している．これを電子の上に乗っている人からみると，電子のまわりを陽子が回転している．回転している陽子は円形電流とみなすことができ，Biot-Savart の法則により，それは電子上に磁場 $\boldsymbol{B}$ をつくる．その磁場が電子のスピンによる磁気双極子モーメント $\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{m}}$ に作用する．この相互作用は，第8章で詳しく説明するように，$\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{m}}\cdot\boldsymbol{B}$ に比例する．$\boldsymbol{\mu}_{\mathrm{m}}$ は(1.1)にあるように，スピン演算子 $\boldsymbol{s}$ に比例している．一方，陽子のつくる磁場 $\boldsymbol{B}$ は，陽子の磁気双極子モーメント $\boldsymbol{\mu}^{(\mathrm{P})}$ に比例し，その $\boldsymbol{\mu}^{(\mathrm{P})}$ は陽子の軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ に比例している．したがってこの場合の電子-陽子間の相互作用のエネルギーは $\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{L}$ に比例する．この相互作用を考慮すると，水素原子のハミルトニアンは

$$H = H_0 + \xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{s} \quad (2.59)$$

と表わされる．ここで，$H_0 = (-\hbar^2/2m)\triangle - (e^2/4\pi\varepsilon_0)/r$ である．(2.59)の右辺の第2項を**スピン-軌道相互作用**という．磁場という物理量は本来相対論的な量なので，(2.59)のスピン-軌道相互作用は相対論的な効果であり，そのために非相対論的理論からは，(2.59)の前の係数 $\xi(r)$ の関数形を一義的に決めることはできない．そこでここでは現象論的立場に立ち，$\xi(r)$ の関数形は未定のままに残しておく．関数 $\xi(r)$ の正確な形は，Dirac の相対論的電子論により決定される．

ハミルトニアンが(2.59)で与えられる系で保存されるのは，電子の全角運動量 $\boldsymbol{L}+\boldsymbol{s}$ であって，$\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{s}$ は別々には保存しない．つまり，$[\boldsymbol{L}, H_0]=0$ であり，また $\boldsymbol{s}$ は位置座標 $\boldsymbol{r}$ と無関係な変数であるから，$[\boldsymbol{s}, H_0]=0$ ではあるが，

$$[\boldsymbol{L},\ \xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{s}] = \xi(r)[\boldsymbol{L},\ \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{s}] = i\hbar\xi(r)\boldsymbol{s}\times\boldsymbol{L} \neq 0,$$
$$[\boldsymbol{s},\ \xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{s}] = \xi(r)[\boldsymbol{s},\ \boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{s}] = -i\hbar\xi(r)\boldsymbol{s}\times\boldsymbol{L} \neq 0$$

となるので，$[\boldsymbol{L}, H]\neq 0$，$[\boldsymbol{s}, H]\neq 0$ だからである．なお，上の第1式では $[\boldsymbol{L}, r]=0$ を利用している．しかし，上の2式の和をとると

$$[\boldsymbol{L}+\boldsymbol{s},\ \xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{s}] = 0 \tag{2.60}$$

である．したがって，$[\boldsymbol{L}+\boldsymbol{s},\ H]=0$ となり，全角運動量 $\hbar\boldsymbol{J}=\boldsymbol{L}+\boldsymbol{s}$ が保存する．

スピン1/2の系の状態関数は，(1.10)のように1行2列の行列で表わされるから，ポテンシャル $V(r)$ とスピン-軌道相互作用の作用のもとにある系の Schrödinger 方程式は

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi(\boldsymbol{r},+)\\ \psi(\boldsymbol{r},-)\end{pmatrix} = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle + V(r)\right]\begin{pmatrix}\psi(\boldsymbol{r},+)\\ \psi(\boldsymbol{r},-)\end{pmatrix}$$
$$+\frac{\hbar}{2}\xi(r)\left\{\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}L_x + \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}L_y + \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}L_z\right\}\begin{pmatrix}\psi(\boldsymbol{r},+)\\ \psi(\boldsymbol{r},-)\end{pmatrix} \tag{2.61}$$

で与えられる．2成分からなる(2.61)の状態関数の座標回転による変換性はどのように表わされるだろうか．簡単のため，x 軸のまわりの微小角 ε の回転を考える．このとき，(2.55)で $\theta=\varepsilon$ とおき，また(2.28)を用いると

$$\begin{pmatrix}{}'\psi(x,y,z,+)\\ {}'\psi(x,y,z,-)\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos(\varepsilon/2) & -i\sin(\varepsilon/2)\\ -i\sin(\varepsilon/2) & \cos(\varepsilon/2)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi(x,y+\varepsilon z,z-\varepsilon y,+)\\ \psi(x,y+\varepsilon z,z-\varepsilon y,-)\end{pmatrix}$$
$$\cong \begin{pmatrix}1 & -i\varepsilon/2\\ -i\varepsilon/2 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1-(i\varepsilon/\hbar)L_x & 0\\ 0 & 1-(i\varepsilon/\hbar)L_x\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi(x,y,z,+)\\ \psi(x,y,z,-)\end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix}1-(i\varepsilon/\hbar)L_x & -i\varepsilon/2\\ -i\varepsilon/2 & 1-(i\varepsilon/\hbar)L_x\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\psi(x,y,z,+)\\ \psi(x,y,z,-)\end{pmatrix}$$
$$= \left[1-(i\varepsilon/\hbar)L_x\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix} - (i\varepsilon/\hbar)\begin{pmatrix}0 & \hbar/2\\ \hbar/2 & 0\end{pmatrix}\right]\begin{pmatrix}\psi(x,y,z,+)\\ \psi(x,y,z,-)\end{pmatrix}$$

となる．すなわち，状態関数の変換式は

$$\begin{pmatrix}{}'\psi(\boldsymbol{r},+)\\ {}'\psi(\boldsymbol{r},-)\end{pmatrix} = \left[1-\frac{i\varepsilon}{\hbar}(L_x+s_x)\right]\begin{pmatrix}\psi(\boldsymbol{r},+)\\ \psi(\boldsymbol{r},-)\end{pmatrix} \tag{2.62}$$

で与えられる．(2.62)を Dirac の記法で表わせば

$$|'\psi\rangle = \hat{U}_x{}^{-1}(\varepsilon)|\psi\rangle = [1-(i\varepsilon/\hbar)(\hat{L}_x+\hat{s}_x)]|\psi\rangle$$

である．したがって

$$\hat{U}_x{}^{-1}(\theta) = \mathrm{e}^{-i\theta(\hat{L}_x+\hat{s}_x)/\hbar}$$

をえる．あるいはまた，$|\psi'\rangle=\hat{U}(\theta)|\psi\rangle$ において

$$\hat{U}_x(\theta) = \mathrm{e}^{i\theta(\hat{L}_x+\hat{s}_x)/\hbar}, \quad \hat{U}_y(\theta) = \mathrm{e}^{i\theta(\hat{L}_y+\hat{s}_y)/\hbar}, \quad \hat{U}_z(\theta) = \mathrm{e}^{i\theta(\hat{L}_z+\hat{s}_z)/\hbar} \tag{2.63}$$

である．

問 34　自由電子に空間的に一様で，$\boldsymbol{B}(t)=(B_0\cos\omega_0 t,\ -B_0\sin\omega_0 t,\ B)$ と時間的に変動する磁場をかけた．ここで B_0 と B は一定値である．はじめ電子のスピンが z 軸の正方向を向いていたとするとき，その後の任意の時刻 t に電子のスピンを z 軸の負方向に発見する確率を求めよ．なお，電子のスピンと磁場の相互作用は $-(e/m)\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B}$ で与えられるものとする．

(7)　スピン1

スピン1の場合，スピン角運動量の行列表示は，(1.21)で与えられる．この行列を用いると

$$J_x{}^2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.64}$$

である．また，$J_x{}^3=J_x$，$J_x{}^4=J_x{}^2$ であることも容易に確かめられる．したがって，一般に

$$J_x{}^{2n} = J_x{}^2, \quad J_x{}^{2n+1} = J_x, \quad n = 1,2,\cdots \tag{2.65}$$

である．これらの関係から

$$\begin{aligned} U_x(\theta) &= \mathrm{e}^{i\theta J_x} = \cos(\theta J_x)+i\sin(\theta J_x) \\ &= \left\{1-\frac{\theta^2}{2!}J_x{}^2+\frac{\theta^4}{4!}J_x{}^4+\cdots\right\}+i\left\{\theta J_x-\frac{\theta^3}{3!}J_x{}^3+\cdots\right\} \\ &= 1-J_x{}^2(1-\cos\theta)+iJ_x\sin\theta \\ &= \begin{pmatrix} (1/2)(1+\cos\theta) & (i/\sqrt{2})\sin\theta & (-1/2)(1-\cos\theta) \\ (i/\sqrt{2})\sin\theta & \cos\theta & (i/\sqrt{2})\sin\theta \\ (-1/2)(1-\cos\theta) & (i/\sqrt{2})\sin\theta & (1/2)(1+\cos\theta) \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2.66}$$

がえられる．ここで $\hat{J}_z$ の固有値 $+1$，0，-1 に属する固有ベクトルを，それぞれ $|+\rangle$，$|0\rangle$，$|-\rangle$ と表わしたとき，任意の状態ベクトル $|\psi\rangle$ の変換式 $|\psi'\rangle=$

$\hat{U}|\psi\rangle$ の表示は

$$\langle + | \psi' \rangle = \langle + | \hat{U} | + \rangle\langle + | \psi \rangle + \langle + | \hat{U} | 0 \rangle\langle 0 | \psi \rangle + \langle + | \hat{U} | - \rangle\langle - | \psi \rangle,$$
$$\langle 0 | \psi' \rangle = \langle 0 | \hat{U} | + \rangle\langle + | \psi \rangle + \langle 0 | \hat{U} | 0 \rangle\langle 0 | \psi \rangle + \langle 0 | \hat{U} | - \rangle\langle - | \psi \rangle,$$
$$\langle - | \psi' \rangle = \langle - | \hat{U} | + \rangle\langle + | \psi \rangle + \langle - | \hat{U} | 0 \rangle\langle 0 | \psi \rangle + \langle - | \hat{U} | - \rangle\langle - | \psi \rangle$$

で与えられる．ここで

$$\begin{aligned} &\langle + | \psi' \rangle = C_+', \quad \langle 0 | \psi' \rangle = C_0', \quad \langle - | \psi' \rangle = C_-', \\ &\langle + | \psi \rangle = C_+, \quad \langle 0 | \psi \rangle = C_0, \quad \langle - | \psi \rangle = C_- \end{aligned} \tag{2.67}$$

と書いて，(2.66)に与えた $\hat{U}_x(\theta)$ の行列表示を用いると，任意の状態関数の変換式は

$$\begin{aligned} C_+' &= (1/2)(1+\cos\theta)C_+ + (i/\sqrt{2})\sin\theta C_0 + (1/2)(-1+\cos\theta)C_-, \\ C_0' &= (i/\sqrt{2})\sin\theta C_+ + \cos\theta C_0 + (i/\sqrt{2})\sin\theta C_-, \\ C_-' &= (1/2)(-1+\cos\theta)C_+ + (i/\sqrt{2})\sin\theta C_0 + (1/2)(1+\cos\theta)C_- \end{aligned} \tag{2.68}$$

と表わされる．ここで

$$C_x = (1/\sqrt{2})(C_+ - C_-), \quad C_y = C_0, \quad C_z = (i/\sqrt{2})(C_+ + C_-)$$

とおくと，(2.68)の変換式は

$$C_x' = C_x, \quad C_y' = C_y\cos\theta + C_z\sin\theta, \quad C_z' = -C_y\sin\theta + C_z\cos\theta \tag{2.69}$$

となる．この変換式の形は(2.20)の $R_x(\theta)$ で表わされる x 軸のまわりの座標の回転に対する座標変換の式と全く同じ形である．このことは，スピン1の粒子の任意の状態ベクトルが，3次元空間のベクトルとして変換することを示している．この事情がスピン1の粒子を**ベクトル粒子**とよぶ理由となっているのである．この状態関数のベクトル性をより一般的な場合に対して確かめるために，一般の変換(2.50)において，Euler 角を $\alpha=\varphi$, $\beta=\theta$, $\gamma=0$ としてみよう．このとき，(2.51)の変換は

$$|\psi'\rangle = \hat{U}(\varphi,\theta,0)|\psi\rangle = e^{i\theta\hat{J}_y}\cdot e^{i\varphi\hat{J}_z}|\psi\rangle \tag{2.70}$$

となる．ここで(1.21)を用いると

$$J_y^2 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \tag{2.71}$$

であり，また(2.65)と同様に，$J_y^{2n}=J_y^2$, $J_y^{2n+1}=J_y$ であることに注意すると

$$\mathrm{e}^{i\theta J_y} = (1-J_y^2)+J_y^2\cos\theta+iJ_y\sin\theta$$
$$= \begin{pmatrix} (1/2)(1+\cos\theta) & (1/\sqrt{2})\sin\theta & (1/2)(1-\cos\theta) \\ -(1/\sqrt{2})\sin\theta & \cos\theta & (1/\sqrt{2})\sin\theta \\ (1/2)(1-\cos\theta) & -(1/\sqrt{2})\sin\theta & (1/2)(1+\cos\theta) \end{pmatrix} \tag{2.72}$$

をえる．全く同様にして

$$J_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.73}$$

であり，$J_z^{2n}=J_z^2$, $J_z^{2n+1}=J_z$ を用いると

$$\mathrm{e}^{i\varphi J_z} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{i\varphi} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \mathrm{e}^{-i\varphi} \end{pmatrix} \tag{2.74}$$

となる．(2.72)と(2.74)より

$$U(\varphi,\theta,0) = \mathrm{e}^{i\theta J_y}\cdot\mathrm{e}^{i\varphi J_z}$$
$$= \begin{pmatrix} (1/2)(1+\cos\theta)\mathrm{e}^{i\varphi} & (1/\sqrt{2})\sin\theta & (1/2)(1-\cos\theta)\mathrm{e}^{-i\varphi} \\ -(1/\sqrt{2})\sin\theta\,\mathrm{e}^{i\varphi} & \cos\theta & (1/\sqrt{2})\sin\theta\,\mathrm{e}^{-i\varphi} \\ (1/2)(1-\cos\theta)\mathrm{e}^{i\varphi} & -(1/\sqrt{2})\sin\theta & (1/2)(1+\cos\theta)\mathrm{e}^{-i\varphi} \end{pmatrix} \tag{2.75}$$

と表わされる．ここで(2.67)の記号を用いると，任意の状態関数の変換式は次式で与えられる．

$$\begin{aligned} C_+' &= (1/2)(1+\cos\theta)\mathrm{e}^{i\varphi}C_+ + (1/\sqrt{2})\sin\theta\,C_0 + (1/2)(1-\cos\theta)\mathrm{e}^{-i\varphi}C_-, \\ C_0' &= -(1/\sqrt{2})\sin\theta\,\mathrm{e}^{i\varphi}C_+ + \cos\theta\,C_0 + (1/\sqrt{2})\sin\theta\,\mathrm{e}^{-i\varphi}C_-, \\ C_-' &= (1/2)(1-\cos\theta)\mathrm{e}^{i\varphi}C_+ - (1/\sqrt{2})\sin\theta\,C_0 + (1/2)(1+\cos\theta)\mathrm{e}^{-i\varphi}C_-. \end{aligned} \tag{2.76}$$

ここで

$$C_x = -(1/\sqrt{2})(C_+-C_-), \qquad C_y = -i(1/\sqrt{2})(C_++C_-), \qquad C_z = C_0 \tag{2.77}$$

とおくと，(2.76)は

$$C_x' = \cos\theta\cdot\cos\varphi\, C_x + \cos\theta\cdot\sin\varphi\, C_y - \sin\theta\, C_z,$$
$$C_y' = \cos\varphi\, C_y - \sin\varphi\, C_x, \tag{2.78}$$
$$C_z' = \sin\theta\cdot\cos\varphi\, C_x + \sin\theta\cdot\sin\varphi\, C_y + \cos\theta\, C_z$$

となる．この結果を(2.22)の $R(\varphi,\theta,0)$ と比較すれば，スピン1の状態のベクトル性をより確かに把握できよう．

なお，(2.75)の行列において

$$\langle 0\,|\hat{U}(\varphi,\theta,0)|+\rangle = -(1/\sqrt{2})\sin\theta\cdot e^{i\varphi} = \sqrt{4\pi/3}\;Y_{1,+1}(\theta,\varphi),$$
$$\langle 0\,|\hat{U}(\varphi,\theta,0)|\,0\,\rangle = \cos\theta = \sqrt{4\pi/3}\;Y_{1,0}(\theta,\varphi),$$
$$\langle 0\,|\hat{U}(\varphi,\theta,0)|-\rangle = +(1/\sqrt{2})\sin\theta\cdot e^{-i\varphi} = \sqrt{4\pi/3}\;Y_{1,-1}(\theta,\varphi)$$

であることを注意しておこう．

問 35 (2.75)の変換行列を用いて，スピン1の角運動量演算子 $\boldsymbol{J}$ がベクトル演算子であることをたしかめよ．

§3 角運動量の合成

§2の(6)で述べたように，スピン-軌道相互作用のあるときに，保存するのは全角運動量 $\boldsymbol{L}+\boldsymbol{s}$ であって，$\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{s}$ は別々には保存しない．また，中心力ポテンシャルのなかにいくつかの電子があるとき，厳密な意味で保存するのは，個々の電子の角運動量ではなくて，全角運動量である．このような場合に，全角運動量の固有値とその固有状態は，個々の粒子のもつ角運動量の固有値と固有状態によってどのように表わされるだろうか．これが角運動量の合成の問題である．

ここでは，2粒子系を考えて，それぞれの粒子の角運動量演算子を $\hat{\boldsymbol{J}}_1$ および $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ とする．1番目の粒子の角運動量の大きさが $\sqrt{j_1(j_1+1)}$ であるとき，$\hat{\boldsymbol{J}}_1{}^2$ と $\hat{J}_{1,z}$ の同時固有ベクトルを

$$|j_1, m_1\rangle\;;\quad m_1 = j_1,\, j_1-1, \cdots, -j_1+1, -j_1 \tag{3.1}$$

とし，2番目の粒子の角運動量の大きさを $\sqrt{j_2(j_2+1)}$ としたとき，$\hat{\boldsymbol{J}}_2{}^2$ と $\hat{J}_{2,z}$ の同時固有ベクトルを

$$|j_2, m_2\rangle\;;\quad m_2 = j_2,\, j_2-1, \cdots, -j_2+1, -j_2 \tag{3.2}$$

と表わそう．なお以下の議論においては，量子数 j_1 と j_2 はある一定値をもつものとする．$\hat{\boldsymbol{J}}_1$ と $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ は，それぞれ別の自由度に属する演算子であるから，そ

れらの和

$$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{J}}_1 + \hat{\boldsymbol{J}}_2 \tag{3.3}$$

は，それぞれの固有ベクトルに

$$\hat{\boldsymbol{J}}|j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle = \{\hat{\boldsymbol{J}}_1|j_1, m_1\rangle\}|j_2, m_2\rangle + |j_1, m_1\rangle\{\hat{\boldsymbol{J}}_2|j_2, m_2\rangle\}$$

のように作用する．

全角運動量 $\hat{\boldsymbol{J}}$ が，$\hat{\boldsymbol{J}}_1$ と $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ のみたす交換関係と同じ形の交換関係

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hat{J}_y \tag{3.4}$$

をみたすことは，$\hat{\boldsymbol{J}}_1$ と $\hat{\boldsymbol{J}}_2$ が交換可能であることからただちに証明することができる．

さて，(3.1)と(3.2)の固有ベクトルから，$(2j_1+1)\times(2j_2+1)$ 個の状態ベクトル

$$|j_1, j_2\,;\, m_1, m_2\rangle \equiv |j_1, m_1\rangle|j_2, m_2\rangle \tag{3.5}$$

をつくることができる．しかしこれらは，一般には全角運動量の $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の固有ベクトルにはなっていない．そこで，(3.5)のそれぞれの粒子の角運動量の固有ベクトルを適当に組み合わせて，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有ベクトルをつくるにはどうしたらよいか．またそのとき $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の固有値はいくらか．これがいまの問題である．

まず，$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = \hat{\boldsymbol{J}}_1{}^2 + \hat{\boldsymbol{J}}_2{}^2 + 2\hat{\boldsymbol{J}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{J}}_2$ であるから

$$[\hat{\boldsymbol{J}}_1{}^2, \hat{J}_z] = [\hat{\boldsymbol{J}}_2{}^2, \hat{J}_z] = [\hat{\boldsymbol{J}}_1{}^2, \hat{\boldsymbol{J}}^2] = [\hat{\boldsymbol{J}}_2{}^2, \hat{\boldsymbol{J}}^2] = 0$$

である．したがって，$\hat{\boldsymbol{J}}_1{}^2$, $\hat{\boldsymbol{J}}_2{}^2$, $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ および $\hat{J}_z$ の同時固有ベクトルが存在する．この状態ベクトルを $|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle$ と表わすことにする．このとき(3.4)の交換関係により，第3章§2のときと全く同様に

$$\begin{aligned}
&\hat{\boldsymbol{J}}^2|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle = j(j+1)|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle,\\
&\hat{J}^{(+)}|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,|j_1, j_2\,;\, j, m+1\rangle,\\
&\hat{J}^{(-)}|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle = \sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,|j_1, j_2\,;\, j, m-1\rangle,\\
&\hat{J}_z|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle = m|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle,\\
&m = j,\, j-1, \cdots, -j+1, -j
\end{aligned} \tag{3.6}$$

が成立する．ここで

$$\hat{J}^{(+)} = \hat{J}_1{}^{(+)} + \hat{J}_2{}^{(+)}, \quad \hat{J}^{(-)} = \hat{J}_1{}^{(-)} + \hat{J}_2{}^{(-)}$$

である．(3.6)の固有ベクトル $|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle$ は，$\hat{\boldsymbol{J}}_1{}^2$ と $\hat{\boldsymbol{J}}_2{}^2$ の固有ベクトルでも

あるから，これは(3.5)の $|j_1, j_2\,;\, m_1, m_2\rangle$ を用いて，次のように展開できるはずである．

$$|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2\,;\, m_1, m_2\rangle\langle j_1, j_2\,;\, m_1, m_2|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle. \tag{3.7}$$

この展開係数 $\langle j_1, j_2\,;\, m_1, m_2|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle$ を **Clebsch-Gordan の係数**という．いまは，j_1 と j_2 の値は固定されているとしているので，以下では j_1 と j_2 を省略して

$$\begin{aligned}&|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle = |j, m\rangle\!\rangle, \qquad |j_1, j_2\,;\, m_1, m_2\rangle = |m_1, m_2\rangle,\\ &|j_1, m_1\rangle = |m_1\rangle, \qquad |j_2, m_2\rangle = |m_2\rangle, \qquad |m_1, m_2\rangle = |m_1\rangle|m_2\rangle,\\ &\langle j_1, j_2\,;\, m_1, m_2|j_1, j_2\,;\, j, m\rangle = \langle m_1, m_2|j, m\rangle\!\rangle\end{aligned} \tag{3.8}$$

と表わすことにする．すると，(3.7)は

$$|j, m\rangle\!\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |m_1, m_2\rangle\langle m_1, m_2|j, m\rangle\!\rangle \tag{3.9}$$

と略記することができる．

各粒子の j_1 と j_2 の値を固定したとき，j と m のとる値を調べることからはじめよう．まず

$$\hat{J}_z|j, m\rangle\!\rangle = \sum_{m_1}\sum_{m_2} (\hat{J}_{1,z} + \hat{J}_{2,z})|m_1, m_2\rangle\langle m_1, m_2|j, m\rangle\!\rangle$$

であるから，(3.6)の第 4 式より

$$\sum_{m_1}\sum_{m_2} \{m - (m_1 + m_2)\}|m_1, m_2\rangle\langle m_1, m_2|j, m\rangle\!\rangle = 0$$

である．すべての $|m_1, m_2\rangle$ はたがいに直交し，また 1 次独立であるから，上の式より $m \neq m_1 + m_2$ のときは $\langle m_1, m_2|j, m\rangle\!\rangle = 0$ であり，$\langle m_1, m_2|j, m\rangle\!\rangle \neq 0$ のときには，$m = m_1 + m_2$ である．したがって，$\hat{J}_z$ の固有値 m は $(m_1 + m_2)$ に等しい．いま，$j_1 \geqq j_2$ と仮定すると，m_1 と m_2 のとる値は，それぞれ

$$\begin{aligned}&m_1 \longrightarrow j_1,\ j_1 - 1, \cdots, -j_1 + 1, -j_1,\\ &m_2 \longrightarrow j_2,\ j_2 - 1, \cdots, -j_2 + 1, -j_2\end{aligned}$$

であるから，m_2 の値を固定して，それに m_1 を加えた $m = m_1 + m_2$ を横に並べて書き出すと

$m_2 \backslash m_1$	j_1	j_1-1	$\cdots\cdots$	$-j_1$
j_2	j_1+j_2	j_1+j_2-1	$\cdots\cdots$	$-j_1+j_2$
j_2-1	j_1+j_2-1	j_1+j_2-2	$\cdots\cdots$	$\cdots\cdots$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		
$-j_2+1$	j_1-j_2+1	j_1-j_2	$\cdots\cdots$	$-j_1-j_2+1$
$-j_2$	j_1-j_2	$\cdots\cdots$	$\cdots\cdots$	$-j_1-j_2$

(3.10)

となる．例えば，$j_1=2,\ j_2=1$ のときは

$m_2 \backslash m_1$	2	1	0	−1	−2
1	3	2	1	0	−1
0	2	1	0	−1	−2
−1	1	0	−1	−2	−3

である．このとき，横の行は状態 $|m_1\rangle$，縦の列は状態 $|m_2\rangle$ に対応している．したがって，表の数値 $m=m_1+m_2$ が同じでも，表の異なる場所に対応する状態はたがいに直交している．例えば，(3.10)の表の $m=j_1+j_2-1$ の2個の状態 $|j_1-1,\ j_2\rangle$ と $|j_1,\ j_2-1\rangle$ は直交している．ここで，上の $(2j_1+1)\times(2j_2+1)$ 個の m の値の表のなかから，図のようにカギ形の枠でかこんだ m の値の組み合わせを取り出して並べかえると，m のとる値を

$$
\begin{aligned}
m &= j_1+j_2,\ j_1+j_2-1, \cdots, -j_1-j_2, && \longrightarrow j = j_1+j_2 \\
m &= j_1+j_2-1,\ j_1+j_2-2, \cdots, -j_1-j_2+1, && \longrightarrow j = j_1+j_2-1 \\
& \cdots\cdots\cdots\cdots && \quad \cdots\cdots \\
m &= j_1-j_2,\ j_1-j_2-1, \cdots, -j_1+j_2, && \longrightarrow j = j_1-j_2
\end{aligned}
\tag{3.11}
$$

と分類することができる．(3.11)の第1行目では，m の最大値は j_1+j_2 で，最小値は $-j_1-j_2$，そしてその個数は $[2(j_1+j_2)+1]$ 個である．このことは，第1行目が $j=j_1+j_2$ のときの m のとる値の表になっていることを示唆している．同様のことが，(3.11)の他の行についてもいえるので，合成された j のとれる値は，(3.11)の右端に示した

$$
j = j_1+j_2,\ j_1+j_2-1, \cdots, |j_1-j_2| \tag{3.12}
$$

で与えられることになる．

しかし，上の主張の正当性は，(3.11)の各行の m の固有値に対応する固有ベクトル $|m_1, m_2\rangle$ から，$\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有ベクトル $|j, m\rangle\!\rangle$ を実際に構成することによって，はじめて保証される．そこでこの仕事を m の最大値 (j_1+j_2) の状態をつくることから始める．(3.10)の表から明らかなように，$m=j_1+j_2$ に対応する状態 $|j_1, j_2\rangle$ はただ1個だけしかないから

$$|j_1+j_2,\ j_1+j_2\rangle\!\rangle = |j_1,\ j_2\rangle \tag{3.13}$$

であると考えられる．実際

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{J}}^2 &= \hat{\boldsymbol{J}}_1{}^2+\hat{\boldsymbol{J}}_2{}^2+2\hat{\boldsymbol{J}}_1\cdot\hat{\boldsymbol{J}}_2\\ &= \hat{\boldsymbol{J}}_1{}^2+\hat{\boldsymbol{J}}_2{}^2+(\hat{J}_1{}^{(-)}\hat{J}_2{}^{(+)}+\hat{J}_1{}^{(+)}\hat{J}_2{}^{(-)})+2\hat{J}_{1,z}\hat{J}_{2,z}\end{aligned} \tag{3.14}$$

と，$\hat{J}_1{}^{(+)}|j_1\rangle=0$，$\hat{J}_2{}^{(+)}|j_2\rangle=0$ より

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{J}}^2|j_1, j_2\rangle &= [j_1(j_1+1)+j_2(j_2+1)+2j_1j_2]|j_1, j_2\rangle\\ &= (j_1+j_2)(j_1+j_2+1)|j_1, j_2\rangle,\\ \hat{J}_z|j_1, j_2\rangle &= \hat{J}_{1,z}|j_1, j_2\rangle+\hat{J}_{2,z}|j_1, j_2\rangle = (j_1+j_2)|j_1, j_2\rangle\end{aligned}$$

となり，$|j_1, j_2\rangle$ は $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ のそれぞれ固有値 $(j_1+j_2)[(j_1+j_2)+1]$ と (j_1+j_2) に属する固有ベクトルになっている．そこで，(3.13)の両辺に演算子 $\hat{J}^{(-)}$ を掛けて(3.6)を用いると，それぞれ

$$\begin{aligned}\hat{J}^{(-)}|j_1+j_2,\ j_1+j_2\rangle\!\rangle &= \sqrt{(j_1+j_2+j_1+j_2)(j_1+j_2-j_1-j_2+1)}\,|j_1+j_2,\ j_1+j_2-1\rangle\!\rangle\\ &= \sqrt{2(j_1+j_2)}\,|j_1+j_2,\ j_1+j_2-1\rangle\!\rangle,\end{aligned}$$

および

$$\begin{aligned}\hat{J}^{(-)}|j_1,\ j_2\rangle &= (\hat{J}_1{}^{(-)}+\hat{J}_2{}^{(-)})|j_1,\ j_2\rangle\\ &= \sqrt{2j_1}\,|j_1-1,\ j_2\rangle+\sqrt{2j_2}\,|j_1,\ j_2-1\rangle\end{aligned}$$

をえる．したがって

$$|j_1+j_2,\ j_1+j_2-1\rangle\!\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\,|j_1-1,\ j_2\rangle+\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\,|j_1,\ j_2-1\rangle \tag{3.15}$$

がえられる．これは(3.11)の1行目の左から2番目の $j=j_1+j_2$，$m=j_1+j_2-1$ の固有値に属する固有ベクトルである．

(3.10)の表をしらべると，$m=j_1+j_2-1$ に属する独立な状態ベクトルは，$|j_1-1,\ j_2\rangle$ と $|j_1,\ j_2-1\rangle$ の2個だけである．したがって，(3.11)の2行目の左端の $j=j_1+j_2-1$，$m=j_1+j_2-1$ に対応する状態ベクトル $|j_1+j_2-1,\ j_1+j_2-1\rangle\!\rangle$ は，上の2個の独立な状態ベクトルから構成され，またそれは(3.15)の状態ベ

クトル $|j_1+j_2,\, j_1+j_2-1\rangle\!\rangle$ に直交するはずである．そこで

$$|j_1+j_2-1,\, j_1+j_2-1\rangle\!\rangle = A\,|j_1-1,\, j_2\rangle + B\,|j_1,\, j_2-1\rangle$$

とおいて，左から $\langle\!\langle j_1+j_2,\, j_1+j_2-1|$ を掛けて内積をつくると，

$$\langle\!\langle j_1+j_2,\, j_1+j_2-1|j_1+j_2-1,\, j_1+j_2-1\rangle\!\rangle = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}A + \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}B = 0.$$

これと状態ベクトル $|j_1+j_2-1,\, j_1+j_2-1\rangle\!\rangle$ の規格化条件 $A^2+B^2=1$ とから，

$$A = -\sqrt{j_2/(j_1+j_2)}, \qquad B = \sqrt{j_1/(j_1+j_2)}$$

をえる．したがって

$$|j_1+j_2-1,\, j_1+j_2-1\rangle\!\rangle = -\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}|j_1-1,\, j_2\rangle + \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}|j_1,\, j_2-1\rangle. \quad (3.16)$$

これが $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の量子数 $j=j_1+j_2-1$，$m=j_1+j_2-1$ に属する固有ベクトルになっていることは，(3.14)の $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ を(3.16)に直接作用させてみれば確かめられる(問36参照)．

次に(3.15)と(3.16)に $\hat{J}^{(-)}$ を掛けると，(3.15)を求めたときと同じ方法で，それぞれ(3.11)の第1行目の左から3番目に対応する状態 $|j_1+j_2,\, j_1+j_2-2\rangle\!\rangle$ および第2行目の左から2番目に対応する状態 $|j_1+j_2-1,\, j_1+j_2-2\rangle\!\rangle$ が求まる．そしてこれらの状態ベクトルに直交する状態として，(3.11)の第3行目の左端に対応する状態 $|j_1+j_2-2,\, j_1+j_2-2\rangle\!\rangle$ をつくることができる．このような手続きを繰りかえすことにより，与えられた j_1 と j_2 に属する $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ と $\hat{J}_z$ の同時固有ベクトル $|j_1,\, j_2\,;\, j, m\rangle = |j, m\rangle\!\rangle$ を構成することができる．

具体例として，ここで2個の電子のスピン角運動量 $\boldsymbol{s}_1$ と $\boldsymbol{s}_2$ を合成したときの全角運動量 $\boldsymbol{s}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$ の大きさ $\boldsymbol{s}^2$ と s_z の同時固有ベクトルを求めよう．このとき，

$$j_1 = 1/2,\ \ m_1 = 1/2, -1/2\,; \quad j_2 = 1/2,\ \ m_2 = 1/2, -1/2$$

であるから，$s_z=s_{1,z}+s_{2,z}$ の固有値は $\hbar$ を単位として，$m=m_1+m_2$ で与えられる．このとき，(3.10)の表は

$m_2 \backslash m_1$	$1/2$	$-1/2$
$1/2$	1	0
$-1/2$	0	-1

となり，したがって，(3.11)は

$$m = 1, 0, -1 \longrightarrow j = 1,$$
$$m = 0 \qquad\qquad \longrightarrow j = 0$$

である．m の値が最大のときの固有ベクトルは，(3.13)より

$$|1,1\rangle\!\rangle = |+,+\rangle \tag{3.17}$$

で与えられる．ここで $|m_1=1/2, m_2=1/2\rangle = |+,+\rangle$ としている．$j=1$, $m=0$ の固有ベクトル $|1,0\rangle\!\rangle$ は

$$(\hat{s}^{(-)}/\hbar)|1,1\rangle\!\rangle = \sqrt{(1+1)(1-1+1)}|1,0\rangle\!\rangle = \sqrt{2}|1,0\rangle\!\rangle$$

と，

$$(\hat{s}^{(-)}/\hbar)|1,1\rangle\!\rangle = (\hat{s}_1{}^{(-)}/\hbar)|+,+\rangle + (\hat{s}_2{}^{(-)}/\hbar)|+,+\rangle$$
$$= |-,+\rangle + |+,-\rangle$$

より，

$$|1,0\rangle\!\rangle = (1/\sqrt{2})\{|-,+\rangle + |+,-\rangle\} \tag{3.18}$$

で与えられる．また，$j=1$, $m=-1$ の固有ベクトル $|1,-1\rangle\!\rangle$ を求めるには，(3.18)にもういちど $\hat{s}^{(-)}/\hbar$ を掛ければよい．すなわち

$$(\hat{s}^{(-)}/\hbar)|1,0\rangle\!\rangle = \sqrt{2}|1,-1\rangle\!\rangle,$$
$$(\hat{s}^{(-)}/\hbar)|1,0\rangle\!\rangle = (1/\sqrt{2})(\hat{s}_1{}^{(-)}/\hbar + \hat{s}_2{}^{(-)}/\hbar)\{|-,+\rangle + |+,-\rangle\}$$
$$= (1/\sqrt{2})\{|-,-\rangle + |-,-\rangle\}$$

より，

$$|1,-1\rangle\!\rangle = |-,-\rangle. \tag{3.19}$$

最後に，$|0,0\rangle\!\rangle$ は(3.18)に直交するベクトルで与えられる．それは次の状態ベクトルである．

$$|0,0\rangle\!\rangle = (1/\sqrt{2})\{|+,-\rangle - |-,+\rangle\}. \tag{3.20}$$

この状態ベクトルは，粒子1と2のいれかえに対して反対称で，この状態を **1重状態**という．これに対して，(3.17),(3.18)および(3.19)の $j=1$ の状態ベクトルは

$$j = 1, \quad \begin{cases} m = 1, & |1,1\rangle\!\rangle = |+,+\rangle \\ m = 0, & |1,0\rangle\!\rangle = (1/\sqrt{2})\{|+,-\rangle + |-,+\rangle\} \\ m = -1, & |1,-1\rangle\!\rangle = |-,-\rangle \end{cases} \tag{3.21}$$

とまとめられる．この3個の固有ベクトルは，粒子のいれかえに対して対称で

あり，(3.21)の状態を**3重状態**という．なお，(1.12)の行列表示を用いて，(3.20)と(3.21)をそれぞれ

$$\begin{aligned}\chi_{0,0} &= (1/\sqrt{2})\{\alpha_1\beta_2-\beta_1\alpha_2\},\\ \chi_{1,1} &= \alpha_1\alpha_2,\\ \chi_{1,0} &= (1/\sqrt{2})\{\alpha_1\beta_2+\beta_1\alpha_2\},\\ \chi_{1,-1} &= \beta_1\beta_2\end{aligned}\tag{3.22}$$

と表わすこともある．

問36　(3.16)が$\hat{\boldsymbol{J}}^2$の量子数$j=j_1+j_2-1$に属する固有ベクトルになっていることを直接たしかめよ．

問37　粒子の軌道角運動量が$l=1$，スピンが$s=1/2$のとき，合成角運動量$\hat{\boldsymbol{L}}+\hat{\boldsymbol{s}}$の固有ベクトルを求めよ．

問38　$j_1=j$, $j_2=1/2$の場合のClebsch-Gordanの係数を求めよ．

第5章

摂 動 論

§1　摂動によるエネルギー準位のずれ

Schrödinger 方程式の束縛状態に対する固有値問題は，井戸型ポテンシャル，調和振動子および水素型原子などの一部の例外的な場合を除いて，ほとんどの場合に厳密解をえることは不可能である．そこで，その種の問題を扱うための近似的解法が必要となる．それらのなかでもっともひろく利用されているのが，ここで述べる摂動論である．**摂動**とは，本来は天文学の言葉であって，それはある惑星の定常的運動の他の惑星からの影響による微小な乱れを意味するものである．この方法は，単に数学的な意味での近似法であるにとどまらず，ある体系に外から何かの作用を加えたとき，その系の示すレスポンスを記述するという意味で，物理的にもきわめて重要な意味をもっている．

いま，解くべき Schrödinger の固有値方程式を

$$\hat{H}|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle \tag{1.1}$$

とする．求めたいのは，(1.1)の固有値 E_i とその固有ベクトル $|\psi_i\rangle$ であるが，それらの厳密解をえることができないとする．しかし，(1.1)の $\hat{H}$ を

$$\hat{H} = \hat{H}_0+\lambda\hat{V} \tag{1.2}$$

と分割したとき，$\hat{H}_0$ の固有値問題

$$\hat{H}_0|i\rangle = E_i^{(0)}|i\rangle \tag{1.3}$$

は正確に解けるものとする．(1.2)の無次元の正のパラメーター $\lambda(\ll 1)$ は，以下の近似の次数を明らかにするために便宜的に追加したもので，実際には摂動項 $\hat{V}$ 自身のなかにその大きさを示すパラメーターが含まれている．したがってそのときは，すべての計算が終了した段階で $\lambda=1$ とすればよい．全ハミルトニアン $\hat{H}$ を(1.2)のように分割するとき，$\hat{H}_0$ をどう選ぶかは問題の本質に

対する物理的洞察によるほかはない．この $\hat{H}_0$ の選び方によって，えられる結果は全く異なるものになるので，そこに物理学者としての能力が反映するといっても過言ではない．なお，(1.3)の固有ベクトル $|i\rangle$ は，直交規格化されていて，

$$\langle i|j\rangle = \delta_{i,j} \tag{1.4}$$

の条件をみたすものとする．

(1)　縮退のない場合

(1.1)の $|\psi_i\rangle$ と E_i をパラメーター λ のベキ級数として，次のように展開する．

$$|\psi_i\rangle = |i\rangle+\lambda|\phi_i^{(1)}\rangle+\lambda^2|\phi_i^{(2)}\rangle+\cdots, \tag{1.5}$$

$$E_i = E_i^{(0)}+\lambda E_i^{(1)}+\lambda^2 E_i^{(2)}+\cdots. \tag{1.6}$$

ここで，(1.3)の固有値 $E_i^{(0)}$ に属する固有状態 $|i\rangle$ には縮退はないものとする．縮退のある場合については，後に述べる．(1.5)と(1.6)の展開式の状態ベクトル $|\phi_i^{(1)}\rangle$, $|\phi_i^{(2)}\rangle$, … と $E_i^{(1)}$, $E_i^{(2)}$, … は，これから決める未知量であり，これらは摂動相互作用 $\lambda\hat{V}$ によって生じる，状態 $|i\rangle$ とエネルギー固有値 $E_i^{(0)}$ からのずれを表わしている．

(1.1)の方程式は，状態ベクトル $|\psi_i\rangle$ に関する線形方程式であるから，状態ベクトル $|\psi_i\rangle$ は定数倍の不定性をもっている．そこでここでは，$|\psi_i\rangle$ に対する規格化条件として

$$\langle i|\psi_i\rangle = 1 \tag{1.7}$$

を要求することにする．(1.4)と(1.7)より，$\langle i|\psi_i\rangle=\langle i|i\rangle=1$ であるから，このとき

$$\langle i|\phi_i^{(1)}\rangle = \langle i|\phi_i^{(2)}\rangle = \cdots = 0 \tag{1.8}$$

である．(1.7)の条件を要求したために，上の状態ベクトル $|\psi_i\rangle$ は普通の規格化条件 $\langle\psi_i|\psi_i\rangle=1$ をみたさない．しかしすぐ後で分かるように，えられた固有ベクトルは λ の1次の程度では，近似的に $\langle\psi_i|\psi_i\rangle=1$ の条件をみたし，またそのとき，(1.8)の直交性のおかげで以下の計算が非常に簡単になるという利点がある．

(1.5)と(1.6)の展開式を(1.1)に代入し，λ に関して同ベキの項を比較すると

$$\begin{aligned}&(E_i^{(0)}-\hat{H}_0)|i\rangle = 0,\\&(E_i^{(0)}-\hat{H}_0)|\phi_i^{(1)}\rangle+E_i^{(1)}|i\rangle = \hat{V}|i\rangle,\\&(E_i^{(0)}-\hat{H}_0)|\phi_i^{(2)}\rangle+E_i^{(1)}|\phi_i^{(1)}\rangle+E_i^{(2)}|i\rangle = \hat{V}|\phi_i^{(1)}\rangle,\\&\cdots\cdots\cdots\end{aligned}\tag{1.9}$$

をえる．ここで第1式は(1.3)にほかならない．第2式に左から状態ベクトル $\langle j|$ を掛けると

$$(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})\langle j|\phi_i^{(1)}\rangle+E_i^{(1)}\delta_{i,j} = \langle j|\hat{V}|i\rangle.\tag{1.10}$$

ここで，$i=j$ とおくと

$$E_i^{(1)} = \langle i|\hat{V}|i\rangle\tag{1.11}$$

がえられる．これは λ の1次のエネルギー固有値の補正項を与える．次に $i\neq j$ とすると，(1.10)の左辺の第2項は消えて

$$\langle j|\phi_i^{(1)}\rangle = \frac{1}{E_i^{(0)}-E_j^{(0)}}\langle j|\hat{V}|i\rangle\tag{1.12}$$

となる．ここで，$j\neq i$ のとき $E_j^{(0)}\neq E_i^{(0)}$ であり，$\hat{H}_0$ の固有値 $E_i^{(0)}$ に属する固有状態には縮退がないとする仮定を利用している．なお，$E_j^{(0)}$ の固有状態には縮退があってもよい．$\hat{H}_0$ の固有ベクトルが完全系を構成しているとき，固有ベクトルの1次の補正として

$$\begin{aligned}|\phi_i^{(1)}\rangle &= \sum_{j=\text{all}}|j\rangle\langle j|\phi_i^{(1)}\rangle = \sum_{j\neq i}|j\rangle\langle j|\phi_i^{(1)}\rangle\\&= \sum_{j\neq i}|j\rangle\langle j|\hat{V}|i\rangle/(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})\end{aligned}\tag{1.13}$$

がえられる．ここで2番目の等号では(1.8)を用い，また3番目では(1.12)を代入した．なお当然のことであるが，(1.13)は(1.4)の直交性により，(1.8)の条件 $\langle i|\phi_i^{(1)}\rangle=0$ をみたしている．

次に λ の2次の補正を求めよう．(1.9)の第3式に左から状態ベクトル $\langle j|$ を掛けると

$$(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})\langle j|\phi_i^{(2)}\rangle+E_i^{(1)}\langle j|\phi_i^{(1)}\rangle+E_i^{(2)}\delta_{i,j} = \langle j|\hat{V}|\phi_i^{(1)}\rangle\tag{1.14}$$

となる．ここで $j=i$ とすると

$$E_i^{(1)}\langle i|\phi_i^{(1)}\rangle+E_i^{(2)} = \langle i|\hat{V}|\phi_i^{(1)}\rangle$$

である．左辺の第1項は(1.8)のおかげで消える．したがって，エネルギー固有値の2次の補正として

$$E_i^{(2)} = \langle i|\hat{V}|\phi_i^{(1)}\rangle = \sum_{j\neq i} \frac{\langle i|\hat{V}|j\rangle\langle j|\hat{V}|i\rangle}{E_i^{(0)}-E_j^{(0)}} \tag{1.15}$$

がえられた．ここで(1.13)を代入した．(1.15)の右辺で，量子数jに関する和をとることによって現われる状態$|j\rangle$を**中間状態**という．(1.15)の表式に対して，はじめ状態$|i\rangle$にあった体系が，摂動相互作用$\hat{V}$によって状態$|j\rangle$に転移し，ふたたび$\hat{V}$によってはじめの状態$|i\rangle$にもどるという描像を与えることができるからである．このとき，(1.15)の右辺のjに関する和で，$j=i$の項が除かれているために，中間状態のエネルギー$E_j^{(0)}$ははじめの状態のエネルギー$E_i^{(0)}$に一致せず，転移の過程で無摂動系$\hat{H}_0$のエネルギーは保存していないことに注意しよう．

次に$j\neq i$とすると，(1.14)は

$$(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})\langle j|\phi_i^{(2)}\rangle + E_i^{(1)}\langle j|\phi_i^{(1)}\rangle = \langle j|\hat{V}|\phi_i^{(1)}\rangle$$

となる．左辺の第2項に(1.11)と(1.12)を，また右辺に(1.13)を代入し，$E_i^{(0)}\neq E_j^{(0)}$であることに注意すると

$$\langle j|\phi_i^{(2)}\rangle = \sum_{k\neq i} \frac{1}{E_i^{(0)}-E_j^{(0)}}\cdot\frac{\langle j|\hat{V}|k\rangle\langle k|\hat{V}|i\rangle}{E_i^{(0)}-E_k^{(0)}} - \frac{\langle i|\hat{V}|i\rangle\langle j|\hat{V}|i\rangle}{(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})^2}\ ; \quad j\neq i$$

がえられる．ここで(1.8)の条件を考慮すると，$\hat{H}$の固有ベクトルの2次の補正項として

$$\begin{aligned}|\phi_i^{(2)}\rangle &= \sum_{j=\mathrm{all}} |j\rangle\langle j|\phi_i^{(2)}\rangle = \sum_{j\neq i} |j\rangle\langle j|\phi_i^{(2)}\rangle \\ &= \sum_{j\neq i} |j\rangle\left[\sum_{k\neq i} \frac{\langle j|\hat{V}|k\rangle\langle k|\hat{V}|i\rangle}{(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})(E_i^{(0)}-E_k^{(0)})} - \frac{\langle i|\hat{V}|i\rangle\langle j|\hat{V}|i\rangle}{(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})^2}\right]\end{aligned} \tag{1.16}$$

をえる．$j\neq i$のとき$\langle i|j\rangle=0$であるから，$\langle i|\phi_i^{(2)}\rangle=0$であり，(1.16)の補正項は(1.8)の条件をみたしている．

以上をまとめると，λの2次までの近似で，$\hat{H}$のエネルギー固有値は

$$E_i = E_i^{(0)} + \lambda\langle i|\hat{V}|i\rangle + \lambda^2 \sum_{j\neq i} \frac{\langle i|\hat{V}|j\rangle\langle j|\hat{V}|i\rangle}{E_i^{(0)}-E_j^{(0)}} \tag{1.17}$$

で与えられ，また$\hat{H}$の固有ベクトルは

$$|\psi_i\rangle = |i\rangle + \lambda \sum_{j \neq i} |j\rangle \frac{\langle j|\hat{V}|i\rangle}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}}$$
$$+ \lambda^2 \sum_{j \neq i} |j\rangle \left[\sum_{k \neq i} \frac{\langle j|\hat{V}|k\rangle\langle k|\hat{V}|i\rangle}{(E_i^{(0)} - E_j^{(0)})(E_i^{(0)} - E_k^{(0)})} - \frac{\langle i|\hat{V}|i\rangle\langle j|\hat{V}|i\rangle}{(E_i^{(0)} - E_j^{(0)})^2} \right] \tag{1.18}$$

と表わされる．(1.18)が $\langle i|\psi_i\rangle = \langle i|i\rangle = 1$ の規格化条件をみたしていることは明らかであろう．(1.18)の状態ベクトルで λ の1次までを残すと，通常の規格化条件 $\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1$ が λ の1次でみたされ，その誤差は λ の2次の量である．すなわち，(1.18)より

$$\langle\psi_i|\psi_i\rangle = \langle i|i\rangle + \lambda \sum_{j \neq i} \frac{1}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}} \{\langle i|\hat{V}|j\rangle\langle j|i\rangle + \langle i|j\rangle\langle j|\hat{V}|i\rangle\} + \mathrm{O}(\lambda^2)$$
$$= 1 + \mathrm{O}(\lambda^2)$$

となる．ここで $j \neq i$ のとき，$\langle j|i\rangle = \langle i|j\rangle = 0$ により，λ の1次の寄与が0になることを利用している．したがって，(1.7)の規格化条件を用いても，λ の1次では $\langle\psi_i|\psi_i\rangle = 1$ がみたされている．

(1.17)において，いま基底状態を考えて，そのエネルギー固有値を E_0 とすると，

$$E_0 = E_0^{(0)} + \lambda\langle 0|\hat{V}|0\rangle + \lambda^2 \sum_{j \neq 0} \frac{|\langle j|\hat{V}|0\rangle|^2}{E_0^{(0)} - E_j^{(0)}} \tag{1.19}$$

となる．ここで $|0\rangle$ と $E_0^{(0)}$ は，$\hat{H}_0$ の基底状態の固有ベクトルとその固有値である．このとき，右辺の2次の補正項は，摂動相互作用 $\hat{V}$ の符号に関係なく負の値をとることに注意されたい．なぜなら，(1.19)の右辺の第3項の分母は，$E_j^{(0)} > E_0^{(0)}$ によりつねに負となるからである．したがって，1次の補正項の $\langle 0|\hat{V}|0\rangle$ が0のとき，E_0 の値は非摂動エネルギー $E_0^{(0)}$ の値よりも低くなり，摂動項はつねに引力としての作用を示す．この性質にもとづいて，いろいろな物理現象を説明することができる．

(2)　基底状態の水素原子の分極率

原子を静電場のなかにおいたときに生じるエネルギー準位のずれを **Stark 効果**という．ここで，摂動論の応用例として，基底状態にある水素原子を z 方向を向く一様な静電場 $\mathcal{E}$ のなかにおいたときの Stark 効果を調べよう．この

系のハミルトニアンは

$$H = H_0 + V, \tag{1.20}$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r}, \qquad V = -ez\mathcal{E} \tag{1.21}$$

で与えられる．ここで m は電子の質量，$e(<0)$はその電荷である．電子を一様な静電場内においたとき，その相互作用のハミルトニアンが(1.21)の第2式で与えられることは，これが $F_z=-\partial V/\partial z=+e\mathcal{E}$ の力を導くことからも分かるが，より一般的には第8章で詳しく説明する．さて，水素原子内の電子に，原点Oにおかれた陽子のつくるCoulomb場が作用するとき，その電場の強さは $|e|/4\pi\varepsilon_0 a_0{}^2$ であり，その大きさは大よそ 5×10^{11} V/m の程度である．これに対して，外から作用する電場 $\mathcal{E}$ の大きさは 10^7 V/m の程度で，(1.21)の相互作用 V の大きさは，H_0 のなかのCoulombポテンシャルの大きさと比べて圧倒的に小さい．したがって，(1.21)の V を摂動項とみなして，上の近似法を適用することができる．このときに，電子のスピン自由度による縮退を別にすれば，水素原子の基底状態は縮退をもたない．(1.20)のハミルトニアンはスピンに無関係であり，したがって，(1.21)の相互作用によってスピンの状態が変化することはない．そこで，電子の特定のスピン状態だけを考えておけば，縮退のないときの摂動論の結果をそのまま利用することができる．(1.19)で $\lambda=1$ とおくと，

$$E_0 = E_0{}^{(0)} - e\langle 0|\hat{z}|0\rangle\mathcal{E} + e^2\mathcal{E}^2\sum_{j\neq 0}\frac{|\langle j|\hat{z}|0\rangle|^2}{E_0{}^{(0)}-E_j{}^{(0)}} \tag{1.22}$$

である．ここで，$\hat{H}_0|0\rangle=E_0{}^{(0)}|0\rangle$ で，水素原子の基底状態の固有ベクトル $|0\rangle$ の位置表示は，第3章(4.23)により

$$\langle \boldsymbol{r}|0\rangle = \psi_{1,0,0}(\boldsymbol{r}) = \frac{2}{\sqrt{4\pi a_0{}^3}}\mathrm{e}^{-r/a_0} \tag{1.23}$$

で与えられる．

全系の基底状態のエネルギー固有値(1.22)を計算するまえに，電子の電気双極子モーメント $\boldsymbol{p}=e\boldsymbol{r}$ の期待値を求めておこう．

電場 $\mathcal{E}$ の作用のもとにある水素原子の基底状態の固有ベクトル $|\psi_0\rangle$ は，(1.18)より λ の1次までで

$$|\psi_0\rangle \cong |0\rangle - e\mathcal{E}\sum_{j\neq 0}|j\rangle\frac{\langle j|\hat{z}|0\rangle}{E_0^{(0)}-E_j^{(0)}}$$

で与えられる．したがって，

$$\begin{aligned}\bar{p}_z &= e\langle\psi_0|\hat{z}|\psi_0\rangle \\ &\cong e\langle 0|\hat{z}|0\rangle - 2e^2\sum_{j\neq 0}\frac{|\langle j|\hat{z}|0\rangle|^2}{E_0^{(0)}-E_j^{(0)}}\mathcal{E}\end{aligned} \tag{1.24}$$

である．右辺の第1項は，電場 $\mathcal{E}$ が0の極限でも残る永久双極子モーメントを与えるが，いまの場合はその値は0である．なぜなら，積分の空間的対称性により

$$\langle 0|\hat{z}|0\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} z|\psi_{1,0,0}(\boldsymbol{r})|^2 \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z = 0 \tag{1.25}$$

となるからである．(1.24)の右辺の第2項は，外部電場 $\mathcal{E}$ によって誘導された電気双極子モーメントである．そこで $\bar{p}_z=\alpha\mathcal{E}$ と書いたとき，この係数 α を**分極率**(polarizability)という．いまの場合，それは(1.24)より

$$\alpha = -2e^2\sum_{j\neq 0}\frac{|\langle j|\hat{z}|0\rangle|^2}{E_0^{(0)}-E_j^{(0)}} > 0 \tag{1.26}$$

で与えられる．(1.25)と(1.26)を用いて(1.24)と(1.22)を表わすと次のようになる．

$$\bar{p}_z = \alpha\mathcal{E}, \qquad E_0 = E_0^{(0)} - (1/2)\alpha\mathcal{E}^2. \tag{1.27}$$

摂動の2次の補正項には，(1.26)にあるように，中間状態の量子数 j に関する和がかならず現われてくる．この種の和を求めることは，第2章(9.39)に述べた選択規則によりその和が有限個で切れてしまう調和振動子の場合を除いて，ほとんどの場合に不可能である．例外的なのがいまの場合であり，このときは(1.26)の右辺の j に関する総和が厳密に求められる．いま仮に演算子 $\hat{G}$ があり，それが

$$\hat{z}|0\rangle = (\hat{G}\cdot\hat{H}_0 - \hat{H}_0\cdot\hat{G})|0\rangle \tag{1.28}$$

の関係をみたすものとする．このとき

$$\begin{aligned}\langle j|\hat{z}|0\rangle &= \langle j|\hat{G}\cdot\hat{H}_0|0\rangle - \langle j|\hat{H}_0\cdot\hat{G}|0\rangle \\ &= (E_0^{(0)}-E_j^{(0)})\langle j|\hat{G}|0\rangle\end{aligned}$$

である．ここで完全性 $\sum_{j=\mathrm{all}}|j\rangle\langle j|=1$ と(1.25)を用いると

$$\sum_{j\neq 0}\frac{\langle 0|\hat{z}|j\rangle\langle j|\hat{z}|0\rangle}{E_0^{(0)}-E_j^{(0)}} = \sum_{j\neq 0}\langle 0|\hat{z}|j\rangle\langle j|\hat{G}|0\rangle$$
$$= \langle 0|\hat{z}\cdot\hat{G}|0\rangle - \langle 0|\hat{z}|0\rangle\langle 0|\hat{G}|0\rangle$$
$$= \langle 0|\hat{z}\cdot\hat{G}|0\rangle \qquad (1.29)$$

と表わされる．そこで，(1.28)の関係をみたす演算子 $\hat{G}$ を求めよう．水素原子のハミルトニアン $\hat{H}_0$ の位置表示をとり，それを極座標系で表わすと

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right\}\right]-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}$$

である．また $\hat{G}$ の位置表示が，微分演算子を含まず $G=G(r,\theta)$ の形をもつと仮定して，(1.28)の右辺を計算すると

$$\langle \boldsymbol{r}|[\hat{G},\hat{H}_0]|0\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2 G}{\partial r^2}+2\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{a_0}\right)\frac{\partial G}{\partial r}\right.$$
$$\left.+\frac{1}{r^2}\left\{\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial G}{\partial\theta}\right)\right\}\right]\psi_{1,0,0}(r)$$

となる．一方(1.28)の左辺は

$$\langle \boldsymbol{r}|\hat{z}|0\rangle = r\cos\theta\cdot\psi_{1,0,0}(r)$$

である．したがって，$G(r,\theta)$ のみたすべき方程式として

$$\frac{\partial^2 G}{\partial r^2}+2\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{a_0}\right)\frac{\partial G}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial G}{\partial\theta}\right) = \frac{2m}{\hbar^2}\cdot r\cos\theta$$

をえる．ここで $G(r,\theta)=g(r)\cos\theta$ とおくと，微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}^2 g}{\mathrm{d}r^2}+2\left(\frac{1}{r}-\frac{1}{a_0}\right)\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}r}-\frac{2g}{r^2} = \frac{2m}{\hbar^2}r$$

がえられる．この方程式の特解が

$$g(r) = -(ma_0/\hbar^2)[r/2+a_0]r$$

であることは，これを上の微分方程式に代入してみればすぐに分かる．したがって，(1.28)の条件をみたす演算子 $\hat{G}$ は

$$\hat{G} = -(ma_0/\hbar^2)[\hat{r}/2+a_0]\hat{z} \qquad (1.30)$$

で与えられる．これを(1.29)に代入し，(1.26)を用いると

$$\alpha = (2e^2ma_0/\hbar^2)\langle 0|\hat{z}(\hat{r}/2+a_0)\hat{z}|0\rangle \qquad (1.31)$$

となる．(1.31)の右辺は(1.23)より

$$\langle 0|\hat{z}\hat{r}\hat{z}|0\rangle = (1/3)\langle 0|\hat{r}(\hat{x}^2+\hat{y}^2+\hat{z}^2)|0\rangle = (1/3)\langle 0|\hat{r}^3|0\rangle$$
$$= \frac{1}{3}\left(\frac{4}{4\pi a_0{}^3}\right)\cdot 4\pi\int_0^\infty \mathrm{e}^{-2r/a_0} r^5 \mathrm{d}r = \frac{5}{2}a_0{}^3,$$
$$\langle 0|\hat{z}^2|0\rangle = (1/3)\langle 0|(\hat{x}^2+\hat{y}^2+\hat{z}^2)|0\rangle = (1/3)\langle 0|\hat{r}^2|0\rangle$$
$$= \frac{1}{3}\left(\frac{4}{4\pi a_0{}^3}\right)\cdot 4\pi\int_0^\infty \mathrm{e}^{-2r/a_0} r^4 \mathrm{d}r = a_0{}^2$$

と計算される．これより分極率は

$$\alpha = \frac{2e^2 m a_0}{\hbar^2}\left(\frac{5}{4}+1\right)a_0{}^3 = \frac{9}{2}\times(4\pi\varepsilon_0 a_0{}^3) \tag{1.32}$$

で与えられる．

なお，(1.32)の右辺の $4\pi\varepsilon_0 a_0{}^3$ は，半径 a_0 の導体球に誘導される電気双極子モーメントである*．(1.32)を(1.27)の第2式に代入すると，外部電場 $\mathcal{E}$ のなかでの水素原子の基底状態のエネルギーとして

$$E_0 = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0} - \frac{9}{4}(4\pi\varepsilon_0 a_0{}^3)\mathcal{E}^2 \tag{1.33}$$

をえる．

問 39　質量 m，電荷 e の1次元の調和振動子が，その運動方向に沿う一様な静電場 $\mathcal{E}$ の作用のもとにあるとき，この系のエネルギー固有値を正確に求め，また上の静電場との相互作用を摂動項にとってエネルギー固有値のずれを第2近似まで求めて，その結果を上の厳密解と比較せよ．

(3) 縮退のある場合

(1.10)で $i \neq j$ で $E_i^{(0)} = E_j^{(0)}$ のとき，すなわち状態 $|i\rangle$ に縮退のあるときには，$\langle j|\hat{V}|i\rangle = 0$ をえる．この行列要素が本当に0ならよいが，そうでないときは間違った結果をえる．したがって，$\hat{H}_0$ の固有値 $E_i^{(0)}$ の状態に縮退のあるときには，(1)とは別の扱いが必要となる．

エネルギー固有値 $E_i^{(0)}$ に属する $\hat{H}_0$ の固有状態が N 重に縮退しているとき，それらの固有ベクトルを量子数 $\alpha = 1, 2, \cdots, N$ で区別して $|i, \alpha\rangle$ で表わし，それらがたがいに直交し，また規格化されていて，$\langle i, \alpha|i, \beta\rangle = \delta_{\alpha,\beta}$ であるよう

* 例えば，砂川重信「電磁気学演習」岩波書店(1987)，p.23を参照．

に選んでおく．また，$E_i^{(0)}$ 以外の他の固有値 $E_j^{(0)}$ に属する固有ベクトルを $|j\rangle$ で表わし，$\langle j'|j\rangle=\delta_{j',j}$ とする．またこのとき，$\langle i,\alpha|j\rangle=0$ ($\alpha=1,2,\cdots,N$) である．縮退のあるときには，N 個の固有ベクトル $|i,\alpha\rangle$ のほかに，これらの任意の線形結合もまた $\hat{H}_0$ の固有ベクトルであり，摂動計算でえられる固有ベクトルのセットが $\lambda\to 0$ の極限で，上のセット $|i,\alpha\rangle$ に一致するとは限らない．そこで，(1.5)の λ に関する展開式の右辺の第1項を，縮退した N 個の固有ベクトル $|i,\beta\rangle$ の重ね合わせとして

$$|i\rangle\!\rangle = \sum_{\beta=1}^{N}|i,\beta\rangle C_\beta \tag{1.34}$$

で与える．係数 C_β を求めることにより，固有ベクトル $|i\rangle\!\rangle$ が決まる．また，$\hat{H}$ の固有ベクトル $|\psi_i\rangle$ の規格化条件としては，(1.7)と同様に

$$\langle\!\langle i|\psi_i\rangle = \langle\!\langle i|i\rangle\!\rangle = \sum_{\beta=1}^{N}|C_\beta|^2 = 1 \tag{1.35}$$

を要請しておく．このとき，(1.5)と(1.6)の展開は

$$\begin{aligned} |\psi_i\rangle &= |i\rangle\!\rangle+\lambda|\phi_i^{(1)}\rangle+\lambda^2|\phi_i^{(2)}\rangle+\cdots, \\ E_i &= E_i^{(0)}+\lambda E_i^{(1)}+\lambda^2 E_i^{(2)}+\cdots \end{aligned} \tag{1.36}$$

と表わされる．(1.36)の展開式を(1.1)に代入して，λ の同ベキの項をとりだすと，(1.9)と全く同様に

$$\begin{aligned} &(E_i^{(0)}-\hat{H}_0)|i\rangle\!\rangle = 0, \\ &(E_i^{(0)}-\hat{H}_0)|\phi_i^{(1)}\rangle+E_i^{(1)}|i\rangle\!\rangle = \hat{V}|i\rangle\!\rangle, \\ &(E_i^{(0)}-\hat{H}_0)|\phi_i^{(2)}\rangle+E_i^{(1)}|\phi_i^{(1)}\rangle+E_i^{(2)}|i\rangle\!\rangle = \hat{V}|\phi_i^{(1)}\rangle \end{aligned} \tag{1.37}$$

である．

(1.37)の第1式は自動的にみたされている．そこで第2式を考える．左から $\langle i,\alpha|$ を掛けると

$$(E_i^{(0)}-E_i^{(0)})\langle i,\alpha|\phi_i^{(1)}\rangle+E_i^{(1)}\langle i,\alpha|i\rangle\!\rangle = \langle i,\alpha|\hat{V}|i\rangle\!\rangle. \tag{1.38}$$

ここで左辺の第1項は0，また(1.34)の展開式を代入して，$\langle i,\alpha|i,\beta\rangle=\delta_{\alpha,\beta}$ を用いると，上式は

$$\sum_{\beta=1}^{N}[E_i^{(1)}\delta_{\alpha,\beta}-\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\beta\rangle]C_\beta = 0 \tag{1.39}$$

となる．この C_β に関する斉1次連立方程式が0以外の解をもつためには，C_β

の係数のつくる行列式が0でなくてはならない．すなわち

$$|E_i^{(1)}\delta_{\alpha,\beta}-\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\beta\rangle| = 0. \tag{1.40}$$

この代数方程式を解くことによって，N 個の解 $E_{i,\alpha}^{(1)}$ が求まり，それらの解に重根がなければ，これで $E_i^{(0)}$ の縮退が除かれる．N 個のそれぞれの解 $E_{i,\alpha}^{(1)}$ ($\alpha=1,2,\cdots,N$) を(1.39)に代入して，(1.35)の規格化条件 $\sum_\beta |C_\beta|^2=1$ のもとで(1.39)を解くことにより，それぞれの解 $E_{i,\alpha}^{(1)}$ に対応する(1.34)の係数が決定する．その係数を改めて $C_{\beta,\alpha}$ と書き，それに対応する(1.34)の固有ベクトルを

$$|i,\alpha\rangle\!\rangle = \sum_{\beta=1}^{N}|i,\beta\rangle C_{\beta,\alpha} \tag{1.41}$$

と書くことにする．このとき，$\langle\!\langle i,\beta|i,\alpha\rangle\!\rangle=\delta_{\alpha,\beta}$ である．こうして決まった固有ベクトル $|i,\alpha\rangle\!\rangle$ を用いると，(1.38)は

$$E_{i,\alpha}^{(1)}\langle i,\gamma|i,\alpha\rangle\!\rangle = \langle i,\gamma|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle$$

と表わされる．ここで $C_{\gamma,\beta}{}^*$ を掛けて γ について和をとると，$E_{i,\alpha}^{(1)}\langle\!\langle i,\beta|i,\alpha\rangle\!\rangle=\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle$ となる．したがって

$$E_{i,\alpha}^{(1)}\delta_{\beta,\alpha} = \langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle, \tag{1.42}$$

これより

$$E_{i,\alpha}^{(1)} = \langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle \tag{1.43}$$

をえる．すなわち，縮退のあるときのエネルギーの1次の補正項は，第0近似の固有ベクトル $|i,\alpha\rangle\!\rangle$ を用いると，縮退のないときの(1.11)の表式と同じ形で与えられる．

(1.40)の解に重根がなく，第1近似で状態 $|i,\alpha\rangle\!\rangle$ のすべての縮退が除かれたとき，第2近似のエネルギーの補正項はどのように表わされるだろうか．まず，(1.37)の第2式に $j\neq i$ の状態ベクトル $\langle j|$ を掛けると

$$(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})\langle j|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle+E_{i,\alpha}^{(1)}\langle j|i,\alpha\rangle\!\rangle = \langle j|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle.$$

左辺の第2項は直交性 $\langle j|i,\alpha\rangle\!\rangle=\sum_\beta\langle j|i,\beta\rangle C_{\beta,\alpha}=0$ により消え，また $E_j^{(0)}\neq E_i^{(0)}$ であるから

$$\langle j|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle = \frac{\langle j|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle}{E_i^{(0)}-E_j^{(0)}} \tag{1.44}$$

をえる．また(1.37)の第3式に $\langle\!\langle i,\alpha|$ を掛けると

$$(E_i^{(0)}-E_i^{(0)})\langle\!\langle i,\alpha|\phi_{i,\alpha}^{(2)}\rangle+E_{i,\alpha}^{(1)}\langle\!\langle i,\alpha|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle+E_{i,\alpha}^{(2)}\langle\!\langle i,\alpha|i,\alpha\rangle\!\rangle$$
$$=\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle.$$

ここで $|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle$ と $|\phi_{i,\alpha}^{(2)}\rangle$ は，(1.36)の展開で第1項の解として $|i,\alpha\rangle\!\rangle$ をとったときの補正項である．このとき，(1.35)，(1.36)より $\langle\!\langle i,\alpha|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle=0$，また $\langle\!\langle i,\alpha|i,\alpha\rangle\!\rangle=1$ であるから

$$E_{i,\alpha}^{(2)}=\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle$$

である．これに完全系 $\sum_{\beta=1}^{N}|i,\beta\rangle\!\rangle\langle\!\langle i,\beta|+\sum_{j\neq i}|j\rangle\langle j|=1$ を挿入し，(1.42)を用いると

$$\begin{aligned}E_{i,\alpha}^{(2)}&=\sum_{\beta=1}^{N}\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\beta\rangle\!\rangle\langle\!\langle i,\beta|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle+\sum_{j\neq i}\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|j\rangle\langle j|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle\\&=\sum_{\beta=1}^{N}E_{i,\alpha}^{(1)}\delta_{\alpha,\beta}\langle\!\langle i,\beta|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle+\sum_{j\neq i}\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|j\rangle\langle j|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle\\&=E_{i,\alpha}^{(1)}\langle\!\langle i,\alpha|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle+\sum_{j\neq i}\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|j\rangle\langle j|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle.\end{aligned}$$

第1項は(1.35)より0であり，第2項には(1.44)を代入すると

$$E_{i,\alpha}^{(2)}=\sum_{j\neq i}\frac{\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|j\rangle\langle j|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle}{E_i^{(0)}-E_j^{(0)}}\tag{1.45}$$

となる．すなわち，固有ベクトル $|i,\alpha\rangle\!\rangle$ を用いると，第2次のエネルギーの補正項もまた，縮退のないときの(1.15)と全く同形である．以上をまとめると，1次の補正によって縮退が解かれるとき，エネルギー固有値は

$$E_{i,\alpha}=E_i^{(0)}+\lambda\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle+\lambda^2\sum_{j\neq i}\frac{\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|j\rangle\langle j|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle}{E_i^{(0)}-E_j^{(0)}}\tag{1.46}$$

で与えられる．

ここで(1.46)が成立するときの状態ベクトルを第1近似で求めよう．(1.37)の第3式に $\langle\!\langle i,\beta|$ $(\beta\neq\alpha)$ を掛けると

$$(E_i^{(0)}-E_i^{(0)})\langle\!\langle i,\beta|\phi_{i,\alpha}^{(2)}\rangle+E_{i,\alpha}^{(1)}\langle\!\langle i,\beta|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle+E_{i,\alpha}^{(2)}\langle\!\langle i,\beta|i,\alpha\rangle\!\rangle$$
$$=\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle.$$

第1項は消え，第3項もまた $\langle\!\langle i,\beta|i,\alpha\rangle\!\rangle=\delta_{\alpha,\beta}=0$ となるから

$$E_{i,\alpha}^{(1)}\langle\!\langle i,\beta|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle=\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle.\tag{1.47}$$

ここで右辺に，完全性の条件 $\sum_{\gamma}|i,\gamma\rangle\!\rangle\langle\!\langle i,\gamma|+\sum_{j\neq i}|j\rangle\langle j|=1$ を挿入して，(1.42)を用いると

$$\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle = \sum_{\gamma}\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|i,\gamma\rangle\!\rangle\langle\!\langle i,\gamma|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle+\sum_{j\neq i}\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|j\rangle\langle j|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle$$
$$= \sum_{\gamma}E_{i,\beta}^{(1)}\delta_{\beta,\gamma}\langle\!\langle i,\gamma|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle+\sum_{j\neq i}\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|j\rangle\langle j|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle.$$

これを(1.47)に代入すると

$$(E_{i,\alpha}^{(1)}-E_{i,\beta}^{(1)})\langle\!\langle i,\beta|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle = \sum_{j\neq i}\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|j\rangle\langle j|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle.$$

1次の摂動で $E_i^{(0)}$ の縮退は全部除かれているとしているから，$E_{i,\alpha}^{(1)}\neq E_{i,\beta}^{(1)}$ である．したがって，(1.44)より $\beta\neq\alpha$ に対して

$$\langle\!\langle i,\beta|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle = \sum_{j\neq i}\frac{1}{E_{i,\alpha}^{(1)}-E_{i,\beta}^{(1)}}\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|j\rangle\langle j|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle$$
$$= \sum_{j\neq i}\frac{\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|j\rangle\langle j|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle}{(E_{i,\alpha}^{(1)}-E_{i,\beta}^{(1)})(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})},\qquad \beta\neq\alpha.$$

これより

$$|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle = \sum_{\beta=1}^{N}|i,\beta\rangle\!\rangle\langle\!\langle i,\beta|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle+\sum_{j\neq i}|j\rangle\langle j|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle$$
$$= \sum_{\beta\neq\alpha}|i,\beta\rangle\!\rangle\langle\!\langle i,\beta|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle+\sum_{j\neq i}|j\rangle\langle j|\phi_{i,\alpha}^{(1)}\rangle$$
$$= \sum_{j\neq i}\sum_{\beta\neq\alpha}|i,\beta\rangle\!\rangle\frac{\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|j\rangle\langle j|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle}{(E_{i,\alpha}^{(1)}-E_{i,\beta}^{(1)})(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})}+\sum_{j\neq i}|j\rangle\frac{\langle j|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle}{E_i^{(0)}-E_j^{(0)}}$$

となる．なお，最後の表式の第1項の分子は $\hat{V}$ の2次であるが，分母の $(E_{i,\alpha}^{(1)}-E_{i,\beta}^{(1)})$ が(1.43)より $\hat{V}$ の1次の量であるから，この項は全体としては $\hat{V}$ の1次の量となっている．以上の結果をまとめると，λ の1次近似で固有ベクトル $|\psi_{i,\alpha}\rangle$ は

$$|\psi_{i,\alpha}\rangle = |i,\alpha\rangle\!\rangle+\lambda\sum_{j\neq i}\left\{\sum_{\beta\neq\alpha}|i,\beta\rangle\!\rangle\frac{\langle\!\langle i,\beta|\hat{V}|j\rangle\langle j|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle}{(E_{i,\alpha}^{(1)}-E_{i,\beta}^{(1)})(E_i^{(0)}-E_j^{(0)})}\right.$$
$$\left.+|j\rangle\frac{\langle j|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle}{E_i^{(0)}-E_j^{(0)}}\right\}\tag{1.48}$$

で与えられる．このとき，(1.35)の条件 $\langle\!\langle i,\alpha|\psi_{i,\alpha}\rangle=1$ は明らかにみたされている．

さて，(1.40)の左辺の行列式において，$\alpha\neq\beta$ に対して $\langle i,\beta|\hat{V}|i,\alpha\rangle=0$ のとき，$E_{i,\alpha}^{(1)}=\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\alpha\rangle$ である．もしこのとき，$\alpha\neq\beta$ に対し

$$\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\alpha\rangle = \langle i,\beta|\hat{V}|i,\beta\rangle$$

であれば，(1.40)は重根をもち，第1近似では縮退は除かれない．これにともなって，これらの重根に対する(1.39)の方程式の解もまた不定になる．このときには，第2章§1(6)で注意したように，(1.40)の行列$\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\beta\rangle$に微小パラメーター$\varepsilon$に比例するエルミート行列を追加して，それらの重根をεの程度の大きさだけ分離しておく．こうして縮退の除かれた解$E_{i,\alpha}^{(1)}(\varepsilon)$に対応する係数$C_{\beta,\alpha}(\varepsilon)$を求め，これからつくられた(1.34)の状態ベクトルを$|i,\alpha\,;\,\varepsilon\rangle\!\rangle$と書くと

$$|i,\alpha\,;\,\varepsilon\rangle\!\rangle = \sum_{\beta}|i,\beta\rangle C_{\beta,\alpha}(\varepsilon)$$

をえる．ここで$\varepsilon\to0$の極限をとれば，N個の固有ベクトル$|i,\alpha\rangle\!\rangle$ ($\alpha=1,2,\cdots,N$)はすべてたがいに直交する．しかし，(1.40)の重根に属する固有ベクトルの直交系は，追加するエルミート行列の選び方によって異なったものになり，それらは一義的には決まらない．

最後に，第1近似では除去できなかった縮退を，第2近似で除く方法について述べておこう．第1近似のエネルギーの補正は，(1.42)に与えた

$$E_{i,\alpha}^{(1)}\delta_{\alpha,\beta} = \langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\beta\rangle\!\rangle$$

で表わされる．ここで，量子数$\alpha,\beta=1,2,\cdots,N$のうち，$\alpha,\beta=1,2,\cdots,h$に対しては

$$E_i^{(1)}\delta_{\alpha,\beta} = \langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\beta\rangle\!\rangle \tag{1.49}$$

で，第1近似ではエネルギーの縮退が除けないとする．一方，$\alpha,\beta=h+1,\cdots,N$に対しては，第1近似で縮退が解けるとし，その場合，ギリシャ文字の量子数α,βをそれぞれローマ文字a,bに書きかえる．すると

$$E_{i,a}^{(1)}\delta_{a,b} = \langle\!\langle i,a|\hat{V}|i,b\rangle\!\rangle \tag{1.50}$$

である．また(1.42)より

$$\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|i,a\rangle\!\rangle = \langle\!\langle i,a|\hat{V}|i,\alpha\rangle\!\rangle = 0 \tag{1.51}$$

が成立する．

さて，(1.36)にならって，第1近似でもなお縮退している量子数αに属する$\hat{H}$の固有ベクトル$|\psi_i\rangle$およびそのエネルギー固有値E_iを，次のように展開する．

$$|\phi_i\rangle = \sum_{\beta=1}^{h} |i,\beta\rangle\!\rangle b_\beta + \lambda|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle + \lambda^2|\phi_i^{(2)}\rangle\!\rangle + \cdots,$$
$$E_i = E_i^{(0)} + \lambda E_i^{(1)} + \lambda^2 E_i^{(2)} + \cdots. \tag{1.52}$$

ここで b_β はこれから決定すべき未定係数である．(1.52)を(1.1)に代入して，λ の同ベキの項をとり出すと，

$$\sum_{\beta=1}^{h} b_\beta (E_i^{(0)} - \hat{H}_0)|i,\beta\rangle\!\rangle = 0,$$

$$(E_i^{(0)} - \hat{H}_0)|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle + \sum_{\beta=1}^{h} E_i^{(1)} b_\beta |i,\beta\rangle\!\rangle = \sum_{\beta=1}^{h} b_\beta \hat{V}|i,\beta\rangle\!\rangle, \tag{1.53}$$

$$(E_i^{(0)} - \hat{H}_0)|\phi_i^{(2)}\rangle\!\rangle + E_i^{(1)}|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle + \sum_{\beta=1}^{h} E_i^{(2)} b_\beta |i,\beta\rangle\!\rangle = \hat{V}|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle$$

である．(1.53)の第1式は当然みたされている．第2式に，第0近似ですでに縮退のない状態ベクトル $\langle j|$ を掛けると

$$(E_i^{(0)} - E_j^{(0)})\langle j|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle + \sum_{\beta=1}^{h} E_i^{(1)} b_\beta \langle j|i,\beta\rangle\!\rangle = \sum_{\beta=1}^{h} b_\beta \langle j|\hat{V}|i,\beta\rangle\!\rangle$$

となる．ここで $\langle j|i,\beta\rangle\!\rangle = 0$ と，$E_i^{(0)} \neq E_j^{(0)}$ を用いると

$$\langle j|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle = \sum_{\beta=1}^{h} b_\beta \frac{\langle j|\hat{V}|i,\beta\rangle\!\rangle}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}} \tag{1.54}$$

をえる．次に(1.53)の第3式に $\langle\!\langle i,\alpha|$ を掛けると

$$(E_i^{(0)} - E_i^{(0)})\langle\!\langle i,\alpha|\phi_i^{(2)}\rangle\!\rangle + E_i^{(1)}\langle\!\langle i,\alpha|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle + \sum_{\beta=1}^{h} E_i^{(2)} b_\beta \langle\!\langle i,\alpha|i,\beta\rangle\!\rangle$$
$$= \langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle.$$

左辺の第1項は消え，また第3項では $\langle\!\langle i,\alpha|i,\beta\rangle\!\rangle = \delta_{\alpha,\beta}$ である．また右辺に $\hat{H}_0$ の固有ベクトルの完全性の条件

$$\sum_{\beta=1}^{h} |i,\beta\rangle\!\rangle\langle\!\langle i,\beta| + \sum_{b=h+1}^{N} |i,b\rangle\!\rangle\langle\!\langle i,b| + \sum_{j\neq i} |j\rangle\langle j| = 1$$

を挿入すると，

$$E_i^{(1)}\langle\!\langle i,\alpha|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle + \sum_{\beta} E_i^{(2)}\delta_{\alpha,\beta} b_\beta$$
$$= \sum_{\beta=1}^{h} \langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\beta\rangle\!\rangle\langle\!\langle i,\beta|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle$$
$$+ \sum_{b=h+1}^{N} \langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|i,b\rangle\!\rangle\langle\!\langle i,b|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle + \sum_{j\neq i} \langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|j\rangle\langle j|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle$$

である．ここで右辺の第1項は，(1.49)より

$$\sum_{\beta=1}^{h}\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|i,\beta\rangle\!\rangle\langle\!\langle i,\beta|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle = E_i^{(1)}\sum_{\beta=1}^{h}\delta_{\alpha,\beta}\langle\!\langle i,\beta|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle = E_i^{(1)}\langle\!\langle i,\alpha|\phi_i^{(1)}\rangle\!\rangle$$

となり，この項は左辺の第1項と相殺する．また，右辺の第2項は(1.51)により消える．右辺の第3項には(1.54)を代入する．すると，

$$\sum_{\beta=1}^{h}\{E_i^{(2)}\delta_{\alpha,\beta}-\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}^{(2)}|i,\beta\rangle\!\rangle\}b_\beta = 0 \tag{1.55}$$

をえる．ここで

$$\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}^{(2)}|i,\beta\rangle\!\rangle \equiv \sum_{j\neq i}\frac{\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}|j\rangle\langle j|\hat{V}|i,\beta\rangle\!\rangle}{E_i^{(0)}-E_j^{(0)}}$$

である．(1.55)が0でない解をもつためには

$$|E_i^{(2)}\delta_{\alpha,\beta}-\langle\!\langle i,\alpha|\hat{V}^{(2)}|i,\beta\rangle\!\rangle| = 0. \tag{1.56}$$

この方程式を解くことにより，第2近似のエネルギーの補正値 $E_i^{(2)}$ が求まり，第1近似では解けなかった縮退が除かれる．

(4)　励起状態の水素原子の Stark 効果

縮退のあるときの摂動計算の例として，主量子数が $n=2$ の励起状態にある水素原子を一様な静電場のなかにおいたときのエネルギー準位のずれを求めよう．このときのハミルトニアンも(1.21)で与えられる．主量子数が $n=2$ のとき，水素原子には，2s ($n=2$；$l=0$, $m=0$) と 2p ($n=2$；$l=1$, $m=0, \pm1$) の4個の状態があり，これらの状態は4重に縮退している．なおこのときもスピンによる2重の縮退があるが，これは考えなくてもよい．これらの状態の固有関数は，第3章(4.23)により，それぞれ

$$\begin{aligned}
\psi_{2,0,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\cdot\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0},\\
\psi_{2,1,0} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\cdot\left(\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0}\cos\theta,\\
\psi_{2,1,\pm1} &= \mp\frac{1}{\sqrt{4\pi}}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2}\cdot\left(\frac{r}{\sqrt{2}a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\pm i\varphi}
\end{aligned} \tag{1.57}$$

で与えられる．これらの固有関数に対応する固有ベクトルを $|n,l,m\rangle$ と表わす．(1.57)を用いると，(1.21)の相互作用 $\hat{V}=-e\hat{z}\mathcal{E}$ の行列要素のうちで0でないのは，$\langle 2,0,0|\hat{z}|2,1,0\rangle$ と $\langle 2,1,0|\hat{z}|2,0,0\rangle$ の2個だけで，その他の行列

要素は積分の空間的対称性によりすべて0である．このことは角θ，または角φに関する積分を実行してみればすぐに分かる．上の残る行列要素の値は

$$\langle 2,0,0|\hat{z}|2,1,0\rangle = \frac{1}{4\pi}\left(\frac{1}{2a_0}\right)^3\cdot\frac{1}{a_0}\int_0^\infty r^4\left(2-\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/a_0}\mathrm{d}r \times\int_0^\pi \cos^2\theta\cdot\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi = -3a_0 \qquad (1.58)$$

となる．したがって

$$\langle 2,0,0|\hat{V}|2,1,0\rangle = \langle 2,1,0|\hat{V}|2,0,0\rangle = +3a_0e\mathcal{E}$$

である．そこで，縮退を示す量子数αについて，$l=0$，$m=0$のとき$\alpha=0$，$l=1$，$m=0$のとき$\alpha=(1,0)$，$l=1$，$m=\pm1$のとき$\alpha=(1,\pm1)$と表わすと，(1.39)の連立方程式は

$$\begin{aligned}&E_2^{(1)}C_0-3a_0e\mathcal{E}C_{1,0}=0, \qquad -3a_0e\mathcal{E}C_0+E_2^{(1)}C_{1,0}=0,\\ &(E_2^{(1)}-\varepsilon)C_{1,+1}=0, \qquad (E_2^{(1)}+\varepsilon)C_{1,-1}=0\end{aligned} \qquad (1.59)$$

となる．ここで第3と第4の方程式のεは重根を分離するために追加した無限小の定数であり，すべての計算が終了した後に0とする．(1.59)の方程式がC_αの0以外の解をもつためには

$$\begin{vmatrix} E_2^{(1)} & -3a_0e\mathcal{E} & 0 & 0\\ -3a_0e\mathcal{E} & E_2^{(1)} & 0 & 0\\ 0 & 0 & E_2^{(1)}-\varepsilon & 0\\ 0 & 0 & 0 & E_2^{(1)}+\varepsilon \end{vmatrix} = 0 \qquad (1.60)$$

が要求される．(1.60)より，$E_2^{(1)}$のとる値は

$$E_2^{(1)} = +3a_0e\mathcal{E},\ -3a_0e\mathcal{E},\ \varepsilon,\ -\varepsilon \qquad (1.61)$$

の4個である．まず，$E_2^{(1)}=+3a_0e\mathcal{E}$のときには，(1.59)の方程式は

$$\begin{aligned}&3a_0e\mathcal{E}C_0-3a_0e\mathcal{E}C_{1,0}=0, \qquad -3a_0e\mathcal{E}C_0+3a_0e\mathcal{E}C_{1,0}=0\\ &(3a_0e\mathcal{E}-\varepsilon)C_{1,+1}=0, \qquad (3a_0e\mathcal{E}+\varepsilon)C_{1,-1}=0\end{aligned}$$

となる．したがって，このとき$C_0=C_{1,0}$，$C_{1,+1}=C_{1,-1}=0$である．規格化条件(1.35)を考慮すると，(1.34)より固有ベクトルは第0近似で

$$\begin{aligned}|2\rangle\!\rangle &= C_0|2,0,0\rangle+C_{1,0}|2,1,0\rangle+C_{1,+1}|2,1,+1\rangle+C_{1,-1}|2,1,-1\rangle\\ &=(1/\sqrt{2})\{|2,0,0\rangle+|2,1,0\rangle\}\end{aligned} \qquad (1.62)$$

で与えられる．次に$E_2^{(1)}=-3a_0e\mathcal{E}$のとき，(1.59)の方程式は

$$C_0+C_{1,0}=0, \quad C_{1,+1}=C_{1,-1}=0$$

となる．したがって，この解に対する第0近似の状態ベクトルは

$$|2\rangle\!\rangle=(1/\sqrt{2})\{|2,0,0\rangle-|2,1,0\rangle\} \tag{1.63}$$

である．$E_2^{(1)}=\varepsilon$ のときには，(1.59)は

$$\varepsilon C_0-3a_0e\mathscr{E}C_{1,0}=0, \quad -3a_0e\mathscr{E}C_0+\varepsilon C_{1,0}=0$$

$$(\varepsilon-\varepsilon)C_{1,+1}=0, \quad 2\varepsilon C_{1,-1}=0$$

となる．したがって，$\varepsilon\to0$ の極限で

$$C_0=C_{1,0}=0, \quad C_{1,+1}\neq0, \quad C_{1,-1}=0$$

をえる．すなわち

$$|2\rangle\!\rangle=|2,1,1\rangle \tag{1.64}$$

である．同様にして，$E_2^{(1)}=-\varepsilon$ のとき，$C_0=C_{1,0}=0$, $C_{1,+1}=0$, $C_{1,-1}\neq0$ となり，このとき

$$|2\rangle\!\rangle=|2,1,-1\rangle. \tag{1.65}$$

ここで，それぞれのエネルギー固有値に対応する第0近似の固有ベクトルを区別するため，

$$|2,+\rangle\!\rangle\equiv(1.62), \quad |2,-\rangle\!\rangle\equiv(1.63),$$

$$|2,+1\rangle\!\rangle\equiv(1.64), \quad |2,-1\rangle\!\rangle\equiv(1.65)$$

と書くと，これらの固有ベクトルは明らかに直交し，また規格化されている．そして，これらの状態における1次のエネルギーの補正値は，それぞれ

$$+3a_0e\mathscr{E},\ -3a_0e\mathscr{E},\ 0,\ 0$$

で与えられる．こうして，静電場のないときには4重に縮退していた $n=2$ のエネルギー準位は，3個のエネルギー準位に分裂する．水素原子の基底状態のStark効果は，電場 $\mathscr{E}$ の2次の効果であったが，$n=2$ の励起状態のときには，それは1次の効果からはじまる．

なお，固有状態 $|2,+\rangle\!\rangle$ と $|2,-\rangle\!\rangle$ での電気双極子モーメントの期待値は，それぞれ，(1.58)より

$$\bar{p}_z=e\langle\!\langle2,+|\hat{z}|2,+\rangle\!\rangle=(e/2)\{\langle2,0,0|\hat{z}|2,1,0\rangle+\langle2,1,0|\hat{z}|2,0,0\rangle\}$$
$$=-3a_0e,$$

$$\bar{p}_z=e\langle\!\langle2,-|\hat{z}|2,-\rangle\!\rangle=-(e/2)\{\langle2,0,0|\hat{z}|2,1,0\rangle+\langle2,1,0|\hat{z}|2,0,0\rangle\}$$
$$=+3a_0e$$

であり，状態 $|2,+\rangle\!\rangle$ と $|2,-\rangle\!\rangle$ では外部電場によらない永久電気双極子モーメントが存在する．なお，状態 $|2,\pm1\rangle\!\rangle$ では

$$\bar{p}_z = e\langle 2,1,1|\hat{z}|2,1,1\rangle = 0, \qquad \bar{p}_z = e\langle 2,1,-1|\hat{z}|2,1,-1\rangle = 0$$

である．

問 40　$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ において，$\hat{H}_0|n\rangle=E_n^{(0)}|n\rangle$ とし，$E_n^{(0)}$ は ε_a，ε_a，ε_b $(\varepsilon_\mathrm{b}>\varepsilon_\mathrm{a})$ の 3 個のエネルギー固有値をもつものとし，$\hat{H}$ の行列が，定数 a と b を用いて

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_\mathrm{a} & 0 & a \\ 0 & \varepsilon_\mathrm{a} & b \\ a^* & b^* & \varepsilon_\mathrm{b} \end{pmatrix}$$

で表わされているとする．このとき，この系のエネルギー固有値を厳密に求め，その結果を縮退のあるときの 2 次の摂動計算の結果と比較せよ．また誤って縮退のないときの摂動法を適用したときの結果と比較せよ．

§2　摂動による状態の転移

前節では，束縛状態のエネルギー固有値とその固有関数を近似的に求める問題を扱った．ここでは，はじめある状態にあった体系が，外からの摂動相互作用によって，他の状態に転移するときの転移確率を求めるという量子力学特有の問題をとりあげる．この種の問題については，時間的に一定の相互作用のもとでの 2 状態系の状態の転移確率を求める問題として，すでに第 2 章§5 (2)で説明した．しかし，体系の固有状態の数が無限個のときや，相互作用 $\hat{V}$ が時間に依存するような少し複雑な問題になると，厳密解をえることはできない．ここでは，そのような場合に利用される近似法について説明する．

(1)　状態の転移に関する摂動論

全系のハミルトニアンが

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}(t) \tag{2.1}$$

で記述される体系を考える．このとき，系の状態の時間的変動を記述する Schrödinger の方程式は

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = (\hat{H}_0 + \hat{V}(t))|\psi(t)\rangle \tag{2.2}$$

で与えられる．なおここでは，オブザーバブルとしての演算子は時間に依存せ

ず，現象の時間的変動は状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ の時間依存性により記述されるとする Schrödinger 表示の理論を用いている．(2.1)の相互作用 $\hat{V}(t)$ の時間依存性は，演算子が時間的に変化するという意味ではなく，相互作用のなかに含まれている古典的量としての c 数の因子のもつ時間依存性によるものである．つまり，$\hat{V}$ の時間依存性は外的な原因によるものであり，時間 t の既知の関数で表わされるものとする．

問題は，はじめ

$$\hat{H}_0|n\rangle = E_n{}^{(0)}|n\rangle \tag{2.3}$$

で定義される固有状態 $|n\rangle$ にあった体系が，摂動 $\hat{V}(t)$ の作用により，他の固有状態 $|m\rangle$ に転移する確率を求めることである．そこで，(2.2)の任意の状態 $|\psi(t)\rangle$ を，$\hat{H}_0$ の固有ベクトルの完全系を用いて

$$|\psi(t)\rangle = \sum_l C_l(t)|l\rangle \mathrm{e}^{-iE_l{}^{(0)}t/\hbar} \tag{2.4}$$

と展開する．ここで展開係数 $C_l(t)$ は時間 t の関数であるが，C_l が時間によらない一定値のときには，(2.4)は無摂動系の Schrödinger の方程式

$$i\hbar \mathrm{d}|\psi(t)\rangle/\mathrm{d}t = \hat{H}_0|\psi(t)\rangle$$

の一般解にほかならない．このことは，展開係数 $C_l(t)$ の時間依存性が，相互作用 $\hat{V}(t)$ の存在からくることを示している．(2.4)を(2.2)に代入し，左から $\langle m|$ を掛けて，直交規格化性 $\langle m|l\rangle=\delta_{m,l}$ を用いると，係数 $C_m(t)$ に関する連立微分方程式

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}C_m(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_l \langle m|\hat{V}(t)|l\rangle \mathrm{e}^{i(E_m{}^{(0)}-E_l{}^{(0)})t/\hbar}C_l(t) \tag{2.5}$$

がえられる．これまでの議論は厳密なもので，何の近似もしていない．また，(2.5)の方程式は，第2章(5.46)に与えた Tomonaga-Schwinger の方程式と実質的に同等の方程式である．(2.3)の $\hat{H}_0$ の固有ベクトル $|n\rangle$ が無限個あるときには，(2.5)の方程式系は一般には無限個の連立方程式であり，このことがまず，(2.5)の厳密解を求めることを困難にしている．また，たとえ(2.5)が有限個の連立方程式であったとしても，相互作用 $\hat{V}(t)$ の時間依存性が厳密解を求めることを困難にする．そこでやむをえず近似的解法を用いることになるのである．

ここで説明する摂動法は，(2.5)の方程式を逐次近似で解く方法である．そこで，近似の程度を明確にするために，§1のときと同様に形式的に摂動パラメーター λ を(2.5)の右辺の相互作用 $\hat{V}(t)$ に追加しておく．さて，(2.4)の展開係数 $C_l(t)$ を次のように展開する．

$$C_l(t) = C_l{}^{(0)}(t) + \lambda C_l{}^{(1)}(t) + \lambda^2 C_l{}^{(2)}(t) + \cdots. \tag{2.6}$$

これを(2.5)に代入して，λ の同ベキの項を比較すると

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}C_m{}^{(0)}(t)}{\mathrm{d}t} &= 0, \\ i\hbar\frac{\mathrm{d}C_m{}^{(1)}(t)}{\mathrm{d}t} &= \sum_l \langle m|\hat{V}(t)|l\rangle \mathrm{e}^{i(E_m{}^{(0)}-E_l{}^{(0)})t/\hbar} C_l{}^{(0)}(t), \\ i\hbar\frac{\mathrm{d}C_m{}^{(2)}(t)}{\mathrm{d}t} &= \sum_l \langle m|\hat{V}(t)|l\rangle \mathrm{e}^{i(E_m{}^{(0)}-E_l{}^{(0)})t/\hbar} C_l{}^{(1)}(t) \end{aligned} \tag{2.7}$$

となる．(2.7)の第1式より，第0近似では $C_m{}^{(0)}=$ 一定で，これは相互作用 $\hat{V}(t)=0$ のときの一般解を与える．そこで初期条件として，$t=t_0$ で系は $\hat{H}_0$ の固有状態 $|n\rangle$ にあったとする．このとき，系は確実にこの状態にあるので

$$C_n{}^{(0)} = 1, \quad C_l{}^{(0)} = 0 \quad (l \neq n), \tag{2.8}$$

あるいは $C_l{}^{(0)}(t)=\delta_{l,n}$ である．これを(2.7)の第2式の右辺に代入すると

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}C_{m,n}{}^{(1)}(t)}{\mathrm{d}t} &= \sum_l \langle m|\hat{V}(t)|l\rangle \mathrm{e}^{i(E_m{}^{(0)}-E_l{}^{(0)})t/\hbar}\delta_{l,n} \\ &= \langle m|\hat{V}(t)|n\rangle \mathrm{e}^{i(E_m{}^{(0)}-E_n{}^{(0)})t/\hbar} \end{aligned}$$

となる．ここで初状態が $|n\rangle$ であったことを記録するため，係数 $C_m{}^{(1)}(t)$ を $C_{m,n}{}^{(1)}(t)$ と書きかえている．この方程式を積分すると

$$C_{m,n}{}^{(1)}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}\langle m|\hat{V}(t)|n\rangle \mathrm{e}^{i(E_m{}^{(0)}-E_n{}^{(0)})t/\hbar}\mathrm{d}t \tag{2.9}$$

である．

展開式(2.6)を(2.4)に代入し，初期条件(2.8)を用いると，λ の1次の近似で，時刻 t の状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ は

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= |n\rangle \mathrm{e}^{-iE_n{}^{(0)}t/\hbar} + \lambda\sum_l C_{l,n}{}^{(1)}(t)|l\rangle \mathrm{e}^{-iE_l{}^{(0)}t/\hbar} \\ &= [1+\lambda C_{n,n}{}^{(1)}(t)]|n\rangle \mathrm{e}^{-iE_n{}^{(0)}t/\hbar} + \lambda\sum_{l\neq n} C_{l,n}{}^{(1)}(t)|l\rangle \mathrm{e}^{-iE_l{}^{(0)}t/\hbar} \end{aligned} \tag{2.10}$$

で与えられる．すなわち，時刻 $t=t_0$ では

$$|\psi(t_0)\rangle = |n\rangle e^{-iE_n^{(0)}t_0/\hbar}$$

であった状態 $|\psi(t_0)\rangle$ が，時刻 t には(2.10)に変わる．(2.10)によると，系が時刻 t で初状態 $|n\rangle$ に残留している確率は

$$|\langle n|\psi(t)\rangle|^2 = |1+\lambda C_{n,n}^{(1)}(t)|^2 \tag{2.11}$$

であり，状態 $|n\rangle$ から状態 $|m\rangle$ への転移確率は

$$|\langle m|\psi(t)\rangle|^2 = \lambda^2|C_{m,n}^{(1)}(t)|^2 \tag{2.12}$$

で与えられる．したがって，(2.11)と(2.12)の確率を求めるには，(2.9)の時間積分を実行して，その結果を(2.11)と(2.12)に代入しさえすればよい．

(2)　時間的に変化しない摂動による転移確率

上の一般論を，摂動相互作用 $\hat{V}$ が時間的に変化しない場合に適用してみよう．はじめの時刻を $t_0=0$ と選ぶと，(2.9)は

$$\begin{aligned} C_{m,n}^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\int_0^t \langle m|\hat{V}|n\rangle e^{i\omega_{m,n}t}dt \\ &= -\frac{i}{\hbar}\langle m|\hat{V}|n\rangle \frac{e^{i\omega_{m,n}t}-1}{i\omega_{m,n}} \end{aligned} \tag{2.13}$$

となる．ここで $\omega_{m,n}\equiv(E_m^{(0)}-E_n^{(0)})/\hbar$ とおいた．したがって，時刻 t に系を状態 $|m\rangle$ に発見する確率は

$$|C_{m,n}^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2}|\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2\cdot 4\sin^2\left(\frac{1}{2}\omega_{m,n}t\right)\Big/\omega_{m,n}^2 \tag{2.14}$$

で与えられる．

時刻 t が，時刻 $t=0$ からわずかしか経っていないで，$\omega_{m,n}t\ll 1$ のとき，(2.14)で $4\sin^2(\omega_{m,n}t/2)\cong\omega_{m,n}^2t^2$ となり，この場合の転移確率は時間 t の2乗に比例する．しかし，仮に系のエネルギー準位の差 $\hbar\omega_{m,n}$ を1 eVの程度とすると，上の条件をみたす時間 t は $1/\omega_{m,n}\sim10^{-16}$ s よりもずっと短い時間である．実際問題として，そのような短時間での観測は不可能であり，通常の測定では $t\gg1/\omega_{m,n}$ である．そのときには

$$\lim_{t\to\infty}\frac{\sin^2(\omega_{m,n}t/2)}{\pi t(\omega_{m,n}/2)^2} = \delta\left(\frac{1}{2}\omega_{m,n}\right) = 2\delta(\omega_{m,n}) \tag{2.15}$$

とすることができる．ここで公式

$$\lim_{t\to\infty} \sin^2 \alpha t/\pi\alpha^2 t = \delta(\alpha) \tag{2.16}$$

を用いている．これが成立することは次のようにして示される．まず $\alpha \neq 0$ のときには

$$\lim_{t\to\infty} \sin^2 \alpha t/\pi\alpha^2 t \longrightarrow 0$$

であり，$\alpha=0$ のときは

$$\lim_{t\to\infty}(1/\pi)(\sin \alpha t/\alpha t)^2 \cdot t = \lim_{t\to\infty} t/\pi \longrightarrow \infty$$

である．また $\xi=\alpha t$ とおくと

$$\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \alpha t}{\alpha^2 t} \mathrm{d}\alpha = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2 \xi}{\xi^2} \mathrm{d}\xi = 1.$$

さらに $\alpha=\alpha_0$ で連続な任意関数 $f(\alpha)$ に対して

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(\alpha-\alpha_0)t}{(\alpha-\alpha_0)^2 t} f(\alpha)\mathrm{d}\alpha = \frac{1}{\pi}\lim_{t\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2\xi}{\xi^2} f\left(\frac{\xi}{t}+\alpha_0\right)\mathrm{d}\xi$$
$$= f(\alpha_0)\cdot\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2\xi}{\xi^2}\mathrm{d}\xi = f(\alpha_0)$$

となって，(2.16)の左辺はデルタ関数としての要件をみたしている．なおここで，$\alpha=\alpha_0+\xi/t$ とおいた．

(2.15)を用いると，(2.14)は

$$|C_{m,n}^{(1)}(t)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2 \delta(E_m^{(0)}-E_n^{(0)})\cdot t$$

となり，通常の観測時刻 $t \gg 1/\omega_{m,n}$ では，転移確率は時間 t に比例する．したがってこのとき，単位時間当りの転移確率 $w_{m,n}$ という概念が意味をもつことになる．すなわち，

$$w_{m,n} = \frac{|C_{m,n}^{(1)}(t)|^2}{t} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle m|\hat{V}|n\rangle|^2 \delta(E_m^{(0)}-E_n^{(0)}). \tag{2.17}$$

この公式を **Fermi の黄金律**という．(2.17)の公式で注目すべきことは，その最後の因子 $\delta(E_m^{(0)}-E_n^{(0)})$ により，初状態と終状態のエネルギーが同一の値をとり，転移の前後でエネルギー保存則が成立していることである．全系のハミ

ルトニアン $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ のエネルギーの値が保存するのは当然のことであるが，相互作用 $\hat{V}$ を含まない無摂動系 $\hat{H}_0$ のエネルギーが保存するというのは決して自明のことではない．

ここで上の理論を，粒子が中心力ポテンシャルにより弾性散乱される場合に適用してみよう．運動量 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ の粒子が，原点Oを中心とするポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ に向かって入射するとき，その波動関数は平面波 $\exp[i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}]$ によって記述される．第2章(3.10)で述べたように，運動量 $\boldsymbol{p}$ は連続的な値をとり，その波動関数は全空間内で無限大に規格化されている．そのため，以下の計算過程で ∞/∞ のような無意味な表式が現われてくることがある．このような不定性を避けるには，空間領域を一辺の大きさが L の有限領域に限り，位置変数 $\boldsymbol{r}=(x,y,z)$ の変域を $L\geqq(x,y,z)\geqq 0$ に制限しておけばよい．このように変域を制限したとき，運動量演算子のエルミート性を保持するには，波動関数にどのような制限が要求されるだろうか．簡単のために1次元の場合をとると，変域 $L\geqq x\geqq 0$ で定義される任意関数 $\psi_1(x)$ と $\psi_2(x)$ に対して，運動量演算子がエルミートであるためには

$$\int_0^L \psi_1{}^*(x)\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi_2(x)\mathrm{d}x = \int_0^L\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_1}{\partial x}\right)^*\cdot\psi_2(x)\mathrm{d}x$$

の条件がみたされていなければならない．右辺を部分積分すると

$$\int_0^L\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_1}{\partial x}\right)^*\cdot\psi_2\mathrm{d}x = -\frac{\hbar}{i}[\psi_1{}^*(x)\psi_2(x)]_0^L+\int_0^L\psi_1{}^*\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi_2}{\partial x}\mathrm{d}x.$$

したがって，運動量演算子がエルミートであるためには，$\psi_1{}^*(L)\psi_2(L)=\psi_1{}^*(0)\psi_2(0)$ が要求される．任意関数 ψ_1 と ψ_2 に定数をも含めれば，この条件は任意関数 ψ が

$$\psi(L)=\psi(0) \tag{2.18}$$

であることを要求している*．この条件をみたし，変域 $L\geqq x\geqq 0$ 内で規格化された運動量演算子の固有関数は

$$\phi_n(x)=(1/\sqrt{L})\mathrm{e}^{ip_nx/\hbar} \tag{2.19}$$

---

*　運動エネルギーの演算子 $H=(-\hbar^2/2m)\partial^2/\partial x^2$ がエルミートであるためには，さらに，微係数に関して $\dfrac{\partial\psi}{\partial x}(L)=\dfrac{\partial\psi}{\partial x}(0)$ が要求される．

で表わされる．このとき，運動量の固有値は

$$p_n = 2\pi\hbar n/L, \qquad n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots \tag{2.20}$$

で与えられる．

(2.18)の条件をみたすものとして，

$$\psi(L) = \psi(0) = 0 \tag{2.21}$$

をとってもよい．このときは規格化された固有関数は

$$\phi_n(x) = \sqrt{2/L}\,\sin(p_n x/\hbar) \tag{2.22}$$

で与えられ，また

$$p_n = \pi\hbar n/L, \qquad n = 1, 2, 3, \cdots \tag{2.23}$$

である．$n=0$ のときには $\phi_n(x)=0$ となり，このとき粒子の存在確率が 0 となるので，$n=0$ は除かれる．しかし，(2.22)よりも，(2.19)の固有関数を利用することが多い．それは，(2.22)を用いるよりも，(2.19)を利用したほうが計算が簡単になるからである．なお，(2.20)または(2.23)で L の値を大きくすれば，固有値 p_n の間の間隔はいくらでも小さくなり，$L\to\infty$ の極限では p_n のとる値は連続的になる．このとき，固有関数は，無限大の領域のなかに粒子が 1 個存在するという規格化条件をみたすことになる．

以上の準備のもとで，話を本筋にもどそう．(2.19)の表式を利用すると，粒子の入射平面波は

$$\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = (1/\sqrt{L^3})\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{2.24}$$

で表わされる．ここで

$$k_x = 2\pi n_x/L, \qquad k_y = 2\pi n_y/L, \qquad k_z = 2\pi n_z/L \tag{2.25}$$

で，$n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots$ である．また散乱後の終状態の運動量の固有値を $\boldsymbol{p}'=\hbar\boldsymbol{k}'$ とすると，その波動関数は

$$\phi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r}) = (1/\sqrt{L^3})\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}$$

で与えられる．このとき，(2.17)の単位時間当りの転移確率は

$$w_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle\boldsymbol{k}'|\hat{V}|\boldsymbol{k}\rangle|^2\,\delta(E_{\boldsymbol{k}}{}^{(0)} - E_{\boldsymbol{k}'}{}^{(0)}) \tag{2.26}$$

となる．ここで

$$\langle\boldsymbol{k}'|\hat{V}|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{1}{L^3}\int_{L^3}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}\,V(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} \tag{2.27}$$

である．

(2.26)のデルタ関数のなかの終状態の粒子のエネルギー $E_{k'}{}^{(0)}$ は，連続スペクトルのなかの一つの値であり，実際に観測されるのは，$E_{k'}{}^{(0)}$ のまわりのある狭い幅 $\Delta E_{k'}$ にわたる積分値である．また，散乱後の粒子の方向も，ある微小立体角 $\Delta\Omega_{k'}$ の範囲よりも詳しくは指定できない．すなわち，(2.26)を観測値と比較するには，上の $\Delta E_{k'}$ と $\Delta\Omega_{k'}$ の範囲にわたって(2.26)を積分しておく必要がある．それぞれの終状態は波数ベクトル $\boldsymbol{k}'$ によって指定され，その近傍の微小領域 $\Delta^3 k'$ のなかに含まれる状態数は，(2.25)の関係により

$$\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = (L/2\pi)^3 \Delta k_x' \Delta k_y' \Delta k_z' \tag{2.28}$$

で与えられる．(2.21)の条件を用いたときは，(2.23)により

$$\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = (L/\pi)^3 \Delta k_x' \Delta k_y' \Delta k_z' = 8\cdot(L/2\pi)^3 \Delta k_x' \Delta k_y' \Delta k_z' \tag{2.29}$$

となるが，(2.28)を積分するとき，その積分領域は3次元の $\boldsymbol{k}'$ 空間の全領域であるのに対して，(2.29)の場合には積分領域は k_x', k_y', k_z' の正の値の領域に限られ，その領域は(2.28)の積分領域の 1/8 である．したがって，(2.28)と(2.29)は結果的には同一の状態数を与える．これまでは，立方体 L^3 をとったときの $\boldsymbol{k}'$ 空間の状態数を考えてきたが，その数は空間領域の形にはよらないことが証明されている．さて，(2.28)は

$$\Delta n_x \Delta n_y \Delta n_z = (L/2\pi\hbar)^3 \Delta^3 p' = (L/2\pi\hbar)^3 \rho(E_{k'}{}^{(0)}) \Delta E_{k'}{}^{(0)} \Delta\Omega_{k'} \tag{2.30}$$

と書きかえられる．ここで

$$\rho(E_{k'}{}^{(0)}) = p'^2 \mathrm{d}p'/\mathrm{d}E_{k'}{}^{(0)} \tag{2.31}$$

であり，これを終状態の**状態密度関数**という．いまの場合は，$E_{k'}{}^{(0)} = p'^2/2m$ であるから，$\Delta E_{k'}{}^{(0)} = p'\Delta p'/m$ より，$\mathrm{d}p'/\mathrm{d}E_{k'}{}^{(0)} = m/p'$ で，$\rho(E_{k'}{}^{(0)}) = mp' = m\hbar k'$ である．

そこで(2.26)を，その終状態について，$\Delta E_{k'}{}^{(0)}$, $\Delta\Omega_{k'}$ の範囲にわたって積分すると，(2.30)により

$$\begin{aligned}
\Delta w_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} &\equiv \int_{\Delta E_{k'}{}^{(0)},\, \Delta\Omega_{k'}} w_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}} \mathrm{d}^3 k' \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} \int |\langle \boldsymbol{k}' | \hat{V} | \boldsymbol{k} \rangle|^2 \delta(E_{\boldsymbol{k}}{}^{(0)} - E_{k'}{}^{(0)}) \cdot \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \rho(E_{k'}{}^{(0)}) \mathrm{d}E_{k'}{}^{(0)} \mathrm{d}\Omega_{k'} \\
&= \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \boldsymbol{k}' | \hat{V} | \boldsymbol{k} \rangle|^2 \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3 \rho(E_{k'}{}^{(0)}) \Delta\Omega_{k'}
\end{aligned}$$

をえる．したがって，

$$\frac{\mathrm{d}w_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}}{\mathrm{d}\Omega_{\boldsymbol{k}'}} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle\boldsymbol{k}'|\hat{V}|\boldsymbol{k}\rangle|^2\frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3}\rho(E_{\boldsymbol{k}'}{}^{(0)}). \tag{2.32}$$

これは，粒子が $E_{\boldsymbol{k}'}{}^{(0)}=E_{\boldsymbol{k}}{}^{(0)}$ をもって，$\boldsymbol{k}'$ の方向の単位立体角内に，単位時間に散乱されてくる確率である．

入射粒子の波動関数は(2.24)で与えられているので，体積 L^3 の立方体内に1個の割合で粒子が存在する．すなわち，単位体積内に $1/L^3$ 個の粒子がある．この粒子が速さ $v=\hbar k/m$ で入射してくるとき，単位断面積を通って，毎秒入射してくる粒子数は $v\times(1/L^3)$ 個である．そこで(2.32)を，$v/L^3=\hbar k/mL^3$ で割り算をすることにより，散乱の微分断面積 $\sigma(\theta)$ がえられる．すなわち

$$\begin{aligned}\sigma(\theta) &= \left(\frac{\mathrm{d}w_{\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}}}{\mathrm{d}\Omega_{\boldsymbol{k}'}}\right)\Bigg/\left(\frac{\hbar k}{mL^3}\right)\\ &= \frac{2\pi}{\hbar}|\langle\boldsymbol{k}'|\hat{V}|\boldsymbol{k}\rangle|^2\frac{L^3}{(2\pi\hbar)^3}\cdot m\hbar k'\Bigg/\left(\frac{\hbar k}{mL^3}\right)\\ &= \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\left(\frac{k'}{k}\right)\left|\int_{-\infty}^{\infty}V(\boldsymbol{r})\mathrm{e}^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\right|^2.\end{aligned} \tag{2.33}$$

ここで(2.27)を用いた．また θ は散乱角で，$\boldsymbol{K}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$，$k=|\boldsymbol{k}|$，$k'=|\boldsymbol{k}'|$ である．なお，いまの弾性散乱の場合には，$k'=k$ である．この表式は，第3章(5.22)の Born 近似の結果と正確に一致している．Born 近似では，散乱問題をそれに適合する境界条件をみたす定常波の問題として扱っていた．一方，(2.33)では散乱現象を，初状態から終状態への状態の転移と考えて時間的に変動する問題として扱っている．このように全く異なる方法を用いてえられた結果が正確に一致するのは偶然のことなのであろうか．この質問に対する解答は，第7章の散乱の一般論で与えられる．

(3)　非弾性散乱

これまでは，中心力ポテンシャルによる粒子の弾性散乱を考えてきた．第3章の定常的な散乱理論では，内部構造をもつ系による粒子の非弾性散乱などを扱うことはできなかった．これに対して，ここで述べた非定常的な理論では，(2.17)の初状態 $|n\rangle$ と終状態 $|m\rangle$ を適当に選ぶことにより，この種のより複雑な問題を扱うこともできる．

その例として，ここでは，基底状態にある水素原子に電子が衝突し，原子内

電子をその励起状態にあげて，入射電子はそのエネルギーの一部を失って散乱される非弾性散乱の微分断面積を求めよう．この体系を記述する非摂動系のハミルトニアンは

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_1 + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2}\right) \tag{2.34}$$

である．ここで右辺の第1項は入射する自由電子のハミルトニアン，第2項は水素原子内の束縛電子のハミルトニアンである．なおこのとき，水素原子の中心の陽子は無限に重いとして，それは散乱過程で座標原点Oに静止しつづけて動かないものと仮定する．摂動項は，2電子間のCoulombの斥力ポテンシャルと，入射電子と陽子間のCoulombの引力ポテンシャルの和

$$V = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1} \tag{2.35}$$

で与えられる．ここで $r_{12}=|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|$ は2電子間の距離である．

いま，波数 $\boldsymbol{k}$ の自由電子が，1s状態 $\psi_{1,0,0}$ の水素原子に衝突し，原子を2s状態 $\psi_{2,0,0}$ に励起して，入射電子は波数 $\boldsymbol{k}'$ をもって散乱される場合を考える．このとき，初状態と終状態の波動関数は，それぞれ

$$(1/\sqrt{L})^3 e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_1}\psi_{1,0,0}(\boldsymbol{r}_2), \qquad (1/\sqrt{L})^3 e^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}_1}\psi_{2,0,0}(\boldsymbol{r}_2) \tag{2.36}$$

で表わされる．この場合，(2.17)の右辺のデルタ関数の示すエネルギー保存則は

$$\hbar^2k^2/2m + E_1 = \hbar^2k'^2/2m + E_2$$

で与えられる．ここで E_1 と E_2 はそれぞれ1sおよび2s状態の水素原子のエネルギー固有値であり，$E_2-E_1=(3/8)mc^2\alpha^2$ である．したがって

$$k'^2 = k^2 - (2m/\hbar^2)\cdot(3/8)\cdot mc^2\alpha^2 \tag{2.37}$$

である．また，(2.17)の行列要素は

$$\langle \boldsymbol{k}', 2\mathrm{s}|\hat{V}|\boldsymbol{k}, 1\mathrm{s}\rangle = \frac{1}{L^3}\int e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_1}\psi_{2,0,0}{}^*(\boldsymbol{r}_2)\left[\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1}\right]\psi_{1,0,0}(\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2 \tag{2.38}$$

で与えられる．ところが，$\langle 2\mathrm{s}|1\mathrm{s}\rangle=0$ であるから，(2.38)の右辺の括弧のなかの第2項からの寄与は0となる．これは当然のことである．なぜなら，陽子が無限に重くて動かないとする限り，入射電子と陽子間の相互作用が原子内の

束縛電子を励起するはずはないからである．(2.38)を用いると，微分断面積は(2.33)より

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \cdot \frac{k'}{k}\left|\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_1}\psi_{2,0,0}{}^*(\boldsymbol{r}_2)\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}\psi_{1,0,0}(\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\right|^2 \tag{2.39}$$

で与えられる．ただし，弾性散乱のときとちがって，いまの場合は $k' \neq k$ であることに注意しよう．

(2.39)の右辺の積分は次のようにして行えばよい．$\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_2 + \boldsymbol{\rho}$ とおいて，積分変数 $\boldsymbol{r}_1$ を $\boldsymbol{\rho}$ に変換すると，積分は2個の独立な積分の積

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{\rho}}\frac{1}{\rho}\mathrm{d}^3\rho \times \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_2}\psi_{2,0,0}{}^*(\boldsymbol{r}_2)\psi_{1,0,0}(\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3r_2$$

に分離してしまう．左側の積分は収束しないが，それはCoulombポテンシャルの場合には，自由電子の初状態と終状態を平面波で表わすことができないことによる．そこでここでは便宜的に，Coulombポテンシャルの $1/\rho$ を $\mathrm{e}^{-\alpha\rho}/\rho$ におきかえて，次のように計算する．

$$\int_0^{\infty}\rho\,\mathrm{d}\rho\int_0^{\pi}\mathrm{e}^{iK\rho\cos\theta}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi = \frac{4\pi}{K}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\rho\sin K\rho$$
$$\equiv \frac{4\pi}{K}\lim_{\alpha\to 0}\int_0^{\infty}\sin K\rho\cdot\mathrm{e}^{-\alpha\rho}\mathrm{d}\rho = \frac{4\pi}{K}\lim_{\alpha\to 0}\frac{K}{K^2+\alpha^2} = \frac{4\pi}{K^2}. \tag{2.40}$$

また，第3章(4.23)の水素原子の固有関数を用いると

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}_2}\psi_{2,0,0}{}^*(\boldsymbol{r}_2)\psi_{1,0,0}(\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3r_2 = \frac{16}{2\sqrt{2}}\cdot\frac{(Ka_0)^2}{[(Ka_0)^2+(3/2)^2]^3} \tag{2.41}$$

となる．(2.40)と(2.41)を(2.39)に代入すると，微分断面積として

$$\sigma(\theta) = \frac{k'}{k}\cdot\frac{128a_0{}^2}{[K^2a_0{}^2+9/4]^6} \tag{2.42}$$

がえられる．ここで

$$K^2 = (\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')^2 = k^2+k'^2-2kk'\cos\theta$$

である．

問41 (2.41)の積分を実行し，微分断面積が(2.42)で与えられ，$ka_0 \gg 1$ のとき全断

面積が

$$\sigma^{\text{tot}} \cong \frac{128\pi}{5k^2}\left(\frac{2}{3}\right)^{10}$$

であることを示せ.

§3　Einstein 係数

(1)　Planck の公式と Einstein 係数

よく知られているように，量子論は1900年の Planck による空洞放射の研究からはじまったものである．空洞の壁を構成している原子は，光を放射し，またそれを再吸収して，原子系と光の系が熱平衡状態にあるとする．Planck が計算したのは，この熱平衡状態での空洞内の電磁波のエネルギー密度であった．体積 L^3 の空洞内において，角振動数が ω と $\omega+\mathrm{d}\omega$ の間にある電磁波のもつ平均エネルギーは

$$\bar{W}(\omega)\mathrm{d}\omega = (\mathrm{d}\omega\text{ 間の電磁波の数})\times(\text{角振動数 }\omega\text{ の電磁波の平均エネルギー}) \tag{3.1}$$

で与えられる．さて，当時は原子を一種の調和振動子であるとみなしていた．第2章(9.45)によると，固有角振動数 ω をもつ振動子の平均エネルギーは

$$\bar{\varepsilon} = \hbar\omega\bar{n} = \frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1} \tag{3.2}$$

である．ここで Planck は，熱平衡状態では電磁波のもつ平均エネルギーは，原子系のもつ平均エネルギーに等しいと考えて，電磁波の平均エネルギーの値が(3.2)で与えられると仮定するのである．次に，$\mathrm{d}\omega$ の間にある電磁波のモード数を計算する．いま，空洞が一辺の長さ L の立方体であるとし，そのなかの電磁波が定常波をつくっているとすると，(2.29)と全く同様にして，波数の大きさが k と $k+\mathrm{d}k$ の間にあり，方向については立体角 $\mathrm{d}\Omega$ のなかに含まれるモード数は，$\mathrm{d}n_x\mathrm{d}n_y\mathrm{d}n_z=(L/\pi)^3k^2\mathrm{d}k\mathrm{d}\Omega$ で与えられる．角積分を行うと，k と $k+\mathrm{d}k$ の間にある電磁波のモード数 $\mathrm{d}N$ は

$$\mathrm{d}N = (L/\pi)^3k^2\mathrm{d}k\cdot 4\pi\times(1/8)\times 2$$

で与えられる．ここで1/8の因子は，(2.29)で述べたように定常波の場合，角積分の領域が全立体角 4π の 1/8 の領域に限られることによるものであり，ま

た最後の 2 の因子は，電磁波が横波であって，その偏りの方向が 2 個あることを考慮したものである．したがって，体積 L^3 の空洞のなかで，角振動数が ω と $\omega+\mathrm{d}\omega$ の間にある電磁波の状態数は，$\omega=ck$ の関係を用いると

$$\mathrm{d}N = \frac{L^3k^2}{\pi^2}\mathrm{d}k = L^3\left(\frac{\omega^2}{\pi^2c^3}\right)\mathrm{d}\omega \tag{3.3}$$

で与えられる．さて，空洞の単位体積当りの電磁波のエネルギーの平均値，すなわち平均エネルギー密度 $\bar{u}$ は $\bar{W}/L^3$ で与えられるから，(3.1),(3.2)および(3.3)により

$$\bar{u}(\omega)\mathrm{d}\omega = (\bar{W}(\omega)/L^3)\mathrm{d}\omega = \left(\frac{\omega^2}{\pi^2c^3}\right)\bar{\varepsilon}\mathrm{d}\omega = \frac{\omega^2}{\pi^2c^3}\frac{\hbar\omega}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega}-1}\mathrm{d}\omega, \tag{3.4}$$

あるいは，$\omega=2\pi\nu$ として振動数 ν を用いれば

$$\bar{u}(\nu)\mathrm{d}\nu = \bar{u}(\omega)\mathrm{d}\omega = \frac{(2\pi\nu)^2}{\pi^2c^3}\frac{h\nu}{\mathrm{e}^{\beta h\nu}-1}\cdot 2\pi\mathrm{d}\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\nu}{\mathrm{e}^{\beta h\nu}-1}\mathrm{d}\nu \tag{3.5}$$

と表わされる．(3.5)の表式がよく知られている **Planck の公式**である．

上に説明したように，Planck 自身は振動子としての原子が不連続なエネルギーをとると仮定したが，空洞内の電磁波，つまり光そのものは Maxwell の方程式で記述される古典的な波動であると考えていた．これに対して Einstein は，光そのものがエネルギー $\hbar\omega$ をもつ光子の集合体であると考え，また原子の振動子モデルを放棄して，原子は単に Bohr のいう定常状態をもち，そのエネルギー準位が E_1, $E_2\,(>E_1)$ で与えられると仮定して，Planck の放射法則にかくされている秘密の扉を開いたのである．

いま，空洞内に分布する原子のうち，低エネルギー準位 E_1 にある原子数を N_1，高エネルギー準位 E_2 にある原子数を N_2 とする．また，簡単のため，ここでは，それらの準位に縮退はないものとする．これらの準位間の原子の状態の転移に伴って放出または吸収される光子のエネルギーは

$$\hbar\omega = E_2-E_1 \tag{3.6}$$

で与えられる．いま，高準位 E_2 にある 1 個の原子をとり，それが自発的に低準位 E_1 の状態に落ちて，エネルギー $\hbar\omega$ をもつ光子を放出する単位時間当りの転移確率を A_{21} と書く．この光の放出現象を**自発放射**という．また，そこにエネルギー密度が $\bar{u}(\omega)$ の光子の分布があれば，低準位 E_1 にある原子は，

そこにある光子を吸収して，高準位 E_2 に転移する．その単位時間当りの転移確率は，そこにあった光のエネルギー密度 $\bar{u}(\omega)$ に比例すると考えられる．そこで，その比例定数を B_{12} で表わす．Einstein はここで，上の二つの過程のほかに，エネルギー密度 $\bar{u}(\omega)$ の光子の分布があると，それに伴って状態 E_2 にある原子が状態 E_1 に転移して，エネルギー $\hbar\omega$ の光子を放出し，その単位時間当りの転移確率は $B_{21}\bar{u}(\omega)$ で与えられるとした．B_{21} は比例定数である．この現象を**誘導放射**という．図 5.1 は上の三つの過程を示したものである．上に与えた 3 個の比例定数 B_{21}, B_{12} および A_{21} を **Einstein 係数**という．

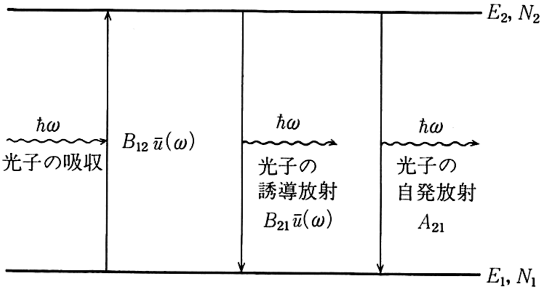


図 5.1　Einstein 係数

上の三つの光の放射過程のもとでの各準位の原子数 N_1 と N_2 の変化の様子は，次の方程式によって記述される．すなわち

$$\mathrm{d}N_1/\mathrm{d}t = N_2A_{21} - N_1B_{12}\bar{u}(\omega) + N_2B_{21}\bar{u}(\omega),$$

$$\mathrm{d}N_2/\mathrm{d}t = -N_2A_{21} + N_1B_{12}\bar{u}(\omega) - N_2B_{21}\bar{u}(\omega),$$

熱平衡状態では，$\mathrm{d}N_1/\mathrm{d}t = \mathrm{d}N_2/\mathrm{d}t = 0$ であるから

$$N_2A_{21} - N_1B_{12}\bar{u}(\omega) + N_2B_{21}\bar{u}(\omega) = 0$$

である．これより

$$\bar{u}(\omega) = \frac{A_{21}}{(N_1/N_2)B_{12} - B_{21}} \tag{3.7}$$

をえる．一方，熱平衡状態では，原子数の分布は Boltzmann 分布で与えられるから

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta E_1}}{\mathrm{e}^{-\beta E_2}}$$

である．これを(3.7)に代入すると，(3.6)より

$$\bar{u}(\omega) = \frac{(A_{21}/B_{21})}{(B_{12}/B_{21})e^{\beta\hbar\omega}-1} \tag{3.8}$$

となる．(3.8)を(3.4)の Planck の公式と比較すると

$$A_{21} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}B_{21}, \qquad B_{21} = B_{12} \tag{3.9}$$

の関係が成立していなければならない．このようにして Einstein は，物理学のなかにはじめて転移確率という概念を導入し，Planck の公式を利用して，それらの確率の間に(3.9)の関係があることを指摘したのである．Einstein のこの仕事は，量子力学が発見される 10 年前の 1916 年になされたのであるから，これ以上のことはできなかったのはやむをえない．この節の目的は，(3.9)の Einstein の B 係数を，量子力学にもとづいて求めることである．

(2) *B* 係数の理論

Einstein の B 係数を求めるため，原子に外部から角振動数 ω_0 の古典的な電波 $\boldsymbol{E}(t)=\boldsymbol{e}\mathscr{E}\cos\omega_0 t$ が作用するとする．ここで $\boldsymbol{e}$ は電波の偏りの方向を示す単位ベクトルであり，$\mathscr{E}$ はその振幅である．このとき，系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}_0+\hat{V}(t)$$

で記述される．ここで $\hat{H}_0$ は原子のハミルトニアンで，相互作用 $\hat{V}(t)$ は，

$$\hat{V}(t) = -e\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{E}(t) = -e(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{e})\mathscr{E}\cos\omega_0 t \tag{3.10}$$

で与えられる．ここで $\hat{\boldsymbol{r}}$ は原子の中心から測った電子の位置を示す演算子である．この相互作用は第 8 章で詳しく説明するように，入射電波の波長が十分に長くて，原子の大きさの領域内で電場をほとんど一様とみなせるときに正しい(電気双極子近似)．さて，原子の固有状態としては，図 5.1 に示した 2 個の状態だけを考えて，

$$\hat{H}_0|i\rangle = E_i|i\rangle, \qquad i = 1,2$$

とし，系の時刻 t における状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ を

$$|\psi(t)\rangle = C_1(t)|1\rangle e^{-iE_1t/\hbar}+C_2(t)|2\rangle e^{-iE_2t/\hbar} \tag{3.11}$$

と展開する．ここで $E_2>E_1$ である．摂動論を用いるために，(3.11)の係数 C_l を

$$C_l(t) = C_l^{(0)}(t)+\lambda C_l^{(1)}(t)+\cdots \tag{3.12}$$

と展開する．いま，(3.9)の B_{12} 係数を求めるために，初期条件として

$$C_1^{(0)}(0)=1, \quad C_2^{(0)}(0)=0 \tag{3.13}$$

ととり，$C_{2,1}^{(1)}(t)\equiv C_2^{(1)}(t)$ と書くと，(2.9)の第1近似の解は

$$\begin{aligned} C_{2,1}^{(1)}(t) &= -\frac{i}{\hbar}\int_0^t V_{21}(t)\mathrm{e}^{i(E_2-E_1)t/\hbar}\mathrm{d}t \\ &= \frac{ie}{\hbar}(\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{r}_{21})\mathcal{E}\cdot\frac{1}{2}\int_0^t[\mathrm{e}^{i(\omega+\omega_0)t}+\mathrm{e}^{i(\omega-\omega_0)t}]\mathrm{d}t \end{aligned} \tag{3.14}$$

で与えられる．ここで積分の対称性から

$$V_{11}=\langle 1|\hat{V}|1\rangle=0, \quad V_{22}=\langle 2|\hat{V}|2\rangle=0$$

であり，$\boldsymbol{r}_{21}=\langle 2|\hat{\boldsymbol{r}}|1\rangle$ とすると

$$\begin{aligned} V_{21}=\langle 2|\hat{V}|1\rangle &= -e(\boldsymbol{e}\cdot\langle 2|\hat{\boldsymbol{r}}|1\rangle)\mathcal{E}\cos\omega_0 t \\ &= -e(\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{r}_{21})(\mathcal{E}/2)[\mathrm{e}^{i\omega_0 t}+\mathrm{e}^{-i\omega_0 t}] \end{aligned}$$

となることを利用している．(3.14)の右辺の時間積分の第1項では，被積分関数ははげしく振動して，その積分値は実質的に0としてよい．そこで第2項だけを残すと

$$C_{2,1}^{(1)}(t)\cong\frac{ie}{\hbar}(\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{r}_{21})\mathcal{E}\cdot\frac{1}{2}\frac{(\mathrm{e}^{i(\omega-\omega_0)t}-1)}{i(\omega-\omega_0)}$$

となる．したがって，時刻 t において，原子を高準位 E_2 の状態に発見する確率は

$$|C_{2,1}^{(1)}(t)|^2=\frac{e^2}{\hbar^2}|\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{r}_{21}|^2\mathcal{E}^2\frac{\sin^2[(\omega-\omega_0)t/2]}{(\omega-\omega_0)^2} \tag{3.15}$$

で与えられる．入射電波の角振動数 ω_0 はある程度の幅をもつので，その ω_0 に関して(3.15)を積分すると

$$\begin{aligned} |C_{2,1}^{(1)}(t)|^2 &= \frac{e^2}{\hbar^2}|\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{r}_{21}|^2\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{E}^2(\omega_0)\frac{\sin^2[(\omega-\omega_0)t/2]}{(\omega-\omega_0)^2}\mathrm{d}\omega_0 \\ &= \frac{e^2}{\hbar^2}|\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{r}_{21}|^2\frac{\pi t}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathcal{E}^2(\omega_0)\delta(\omega-\omega_0)\mathrm{d}\omega_0 \\ &= (e/\hbar)^2|\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{r}_{21}|^2\pi t\cdot\mathcal{E}^2(\omega)/2 \end{aligned}$$

がえられる．ここで(2.16)を用いている．

入射電磁波の1周期当りの平均エネルギー密度は $\bar{u}(\omega)=(\varepsilon_0/2)\mathcal{E}^2(\omega)$ であ

る．したがって，単位時間当りの転移確率は

$$|C_{2,1}{}^{(1)}(t)|^2/t = (\pi e^2/\varepsilon_0\hbar^2)|\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{r}_{21}|^2\bar{u}(\omega) \tag{3.16}$$

で表わされる．空洞放射の場合には，原子に入射する電波の偏りの方向は乱雑で一定していない．そこで $\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{r}_{21}=r_{21}\cos\theta$ とおき，偏りの方向に関して全立体角にわたって平均すると

$$\frac{1}{4\pi}\int\cos^2\theta\,\mathrm{d}\Omega = \frac{1}{4\pi}\int_0^{\pi}\cos^2\theta\cdot\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi = \frac{1}{3}$$

となる．(3.16)でこの平均をとったものが，さきの $B_{12}\bar{u}(\omega)$ にほかならない．すなわち

$$B_{12}\bar{u}(\omega) = \frac{1}{3}\left(\frac{\pi e^2}{\varepsilon_0\hbar^2}\right)|\boldsymbol{r}_{21}|^2\bar{u}(\omega)$$

である．これより，Einstein の B 係数は

$$B_{12} = B_{21} = (\pi e^2/3\varepsilon_0\hbar^2)|\boldsymbol{r}_{21}|^2 \tag{3.17}$$

で与えられることが分かる．ここで(3.9)を利用すると

$$A_{21} = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3}B_{21} = \frac{e^2\omega^3}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3}|\boldsymbol{r}_{21}|^2 \tag{3.18}$$

がえられる．(3.17)の B 係数は光子の角振動数 ω によらない定数であるのに対して，A 係数は ω^3 に比例していて，ω が大きくなると自発放射の確率は急激に増大することに注目しよう．

問 42 基底状態の水素原子を電極間におき，両極板の間に一様な電場 $\mathcal{E}(t)$ をかけたとする．このとき，$t<0$ で $\mathcal{E}(t)=0$，$t\geqq 0$ で $\mathcal{E}(t)=\mathcal{E}_0\mathrm{e}^{-t/\tau}$ $(\tau>0)$ とすると，十分長い時間の後に，原子を 2s 状態，または 2p 状態のうちのどれか一つの状態に発見する確率を求めよ．

§4 選択規則

電場との相互作用による原子の状態間の転移確率は，(3.17)と(3.18)でみたように，電子の位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ の行列要素 $\boldsymbol{r}_{21}$ の絶対値の 2 乗

$$|\boldsymbol{r}_{21}|^2 = |x_{21}|^2+|y_{21}|^2+|z_{21}|^2 \tag{4.1}$$

で決まる．すなわち，(4.1)の右辺の行列要素 x_{21}，y_{21}，z_{21} のうち少なくとも 1 個が 0 でなければ，状態 $|1\rangle$ から状態 $|2\rangle$ への転移が可能であり，それらが全

部0のときには，その状態間の転移は禁止される．どのような状態間の転移が可能であるかを示す規則を**選択規則**という．選択規則の例としては，調和振動子の場合に，(4.1)が $n \to n\pm 1$ のときだけ0でないことを第2章で述べたことがあげられる．ここでは，中心力ポテンシャル内で運動する電子の転移に関する選択規則について説明しよう．これに関しては，すでに水素原子のStark効果およびEinsteinの B 係数の理論などで具体例に出会ってきたが，ここではこの問題をより一般的に扱うことにする．

まず，軌道角運動量の z 成分 L_z の固有値である磁気量子数 m に関する選択規則からはじめよう．第3章(1.13)で定義される軌道角運動量 $\hat{\boldsymbol{L}}=\hbar\hat{\boldsymbol{M}}$ が，交換関係

$$[\hat{M}_x, \hat{z}] = -i\hat{y}, \quad [\hat{M}_y, \hat{z}] = +i\hat{x}, \quad [\hat{M}_z, \hat{z}] = 0 \tag{4.2}$$

をみたすことはすぐに確かめられる．そこで $\hat{M}_z|m\rangle = m|m\rangle$ とすると

$$\langle m'|[\hat{M}_z, \hat{z}]|m\rangle = (m'-m)\langle m'|\hat{z}|m\rangle = 0 \tag{4.3}$$

である．すなわち，$m' \neq m$ のとき $\langle m'|\hat{z}|m\rangle=0$ で，$m'=m$ のとき一般に $\langle m'|\hat{z}|m\rangle \neq 0$ である．したがって，磁気量子数の変化のないとき，つまり $\Delta m=0$ のとき転移が可能である．

次に

$$[\hat{M}_z, \hat{x}] = i\hat{y}, \quad [\hat{M}_z, \hat{y}] = -i\hat{x}$$

であるから，

$$[\hat{M}_z, [\hat{M}_z, \hat{x}]] = i[\hat{M}_z, \hat{y}] = +\hat{x}$$

である．これより

$$\hat{M}_z{}^2\hat{x} - 2\hat{M}_z\hat{x}\hat{M}_z + \hat{x}\hat{M}_z{}^2 - \hat{x} = 0.$$

この式の行列要素をとると

$$(m'^2 - 2m'm + m^2 - 1)\langle m'|\hat{x}|m\rangle = 0$$

となる．因数分解すると

$$(m'-m-1)(m'-m+1)\langle m'|\hat{x}|m\rangle = 0 \tag{4.4}$$

である．したがって，$m' \neq m\pm 1$ のとき $\langle m'|\hat{x}|m\rangle=0$，また $m'=m\pm 1$ のとき一般に $\langle m'|\hat{x}|m\rangle \neq 0$ である．全く同様にして

$$\hat{M}_z{}^2\hat{y} - 2\hat{M}_z\hat{y}\hat{M}_z + \hat{y}\hat{M}_z{}^2 - \hat{y} = 0$$

がえられるから，

$$(m'-m-1)(m'-m+1)\langle m'|\hat{y}|m\rangle = 0. \tag{4.5}$$

これより，$m' \neq m\pm 1$ のとき $\langle m'|\hat{y}|m\rangle=0$，$m'=m\pm 1$ のとき $\langle m'|\hat{y}|m\rangle\neq 0$ である．以上をまとめると，$|\boldsymbol{r}_{21}|^2$ が 0 でないのは，磁気量子数の変化が

$$\Delta m = 0, \pm 1 \tag{4.6}$$

のときである．

次に軌道角運動量の大きさの 2 乗 $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ の固有値を指定する方位量子数 l に関する選択規則を求めよう．(4.2)より

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{z}] &= [\hat{M}_x{}^2, \hat{z}]+[\hat{M}_y{}^2, \hat{z}] \\ &= \hat{M}_x[\hat{M}_x, \hat{z}]+[\hat{M}_x, \hat{z}]\hat{M}_x+\hat{M}_y[\hat{M}_y, \hat{z}]+[\hat{M}_y, \hat{z}]\hat{M}_y \\ &= i\{(\hat{M}_y\hat{x}+\hat{x}\hat{M}_y)-(\hat{M}_x\hat{y}+\hat{y}\hat{M}_x)\} \\ &= 2i\{(\hat{M}_y\hat{x}-\hat{M}_x\hat{y})+i\hat{z}\}\end{aligned} \tag{4.7}$$

となる．最後の等号では，$[\hat{M}_y, \hat{x}]=-i\hat{z}$，$[\hat{M}_x, \hat{y}]=i\hat{z}$ を用いている．あるいはまた(4.7)は

$$[\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{z}] = 2i(\hat{x}\hat{M}_y-\hat{M}_x\hat{y}) = 2i(\hat{M}_y\hat{x}-\hat{y}\hat{M}_x) \tag{4.8}$$

と書くこともできる．同様にして

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{x}] &= 2i(\hat{y}\hat{M}_z-\hat{M}_y\hat{z}) = 2i(\hat{M}_z\hat{y}-\hat{z}\hat{M}_y), \\ [\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{y}] &= 2i(\hat{z}\hat{M}_x-\hat{M}_z\hat{x}) = 2i(\hat{M}_x\hat{z}-\hat{x}\hat{M}_z)\end{aligned} \tag{4.9}$$

である．そこで，(4.7)，(4.8)および(4.9)を用いると

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{M}}^2, [\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{z}]] &= [\hat{\boldsymbol{M}}^2, 2i\{(\hat{M}_y\hat{x}-\hat{M}_x\hat{y})+i\hat{z}\}] \\ &= 2i\{\hat{M}_y[\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{x}]-\hat{M}_x[\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{y}]+i[\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{z}]\} \\ &= 2i\{2i\hat{M}_y(\hat{y}\hat{M}_z-\hat{M}_y\hat{z})-2i\hat{M}_x(\hat{M}_x\hat{z}-\hat{x}\hat{M}_z)+i[\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{z}]\} \\ &= -2\{2(\hat{M}_x\hat{x}+\hat{M}_y\hat{y}+\hat{M}_z\hat{z})\hat{M}_z-2(\hat{M}_x{}^2+\hat{M}_y{}^2+\hat{M}_z{}^2)\hat{z}+\hat{\boldsymbol{M}}^2\hat{z}-\hat{z}\hat{\boldsymbol{M}}^2\}\end{aligned}$$

となる．ところが $\hat{\boldsymbol{L}}=\hbar\hat{\boldsymbol{M}}=\hat{\boldsymbol{r}}\times\hat{\boldsymbol{p}}$ の定義から，$\hat{M}_x\hat{x}+\hat{M}_y\hat{y}+\hat{M}_z\hat{z}=0$ であるから

$$[\hat{\boldsymbol{M}}^2, [\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{z}]] = 2(\hat{\boldsymbol{M}}^2\hat{z}+\hat{z}\hat{\boldsymbol{M}}^2) \tag{4.10}$$

である．全く同様にして，

$$\begin{aligned}[\hat{\boldsymbol{M}}^2, [\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{x}]] &= 2(\hat{\boldsymbol{M}}^2\hat{x}+\hat{x}\hat{\boldsymbol{M}}^2), \\ [\hat{\boldsymbol{M}}^2, [\hat{\boldsymbol{M}}^2, \hat{y}]] &= 2(\hat{\boldsymbol{M}}^2\hat{y}+\hat{y}\hat{\boldsymbol{M}}^2).\end{aligned} \tag{4.11}$$

ここで

$$\hat{\boldsymbol{M}}^2|l\rangle = l(l+1)|l\rangle$$

としたとき，(4.10)の $|l\rangle$ に関する行列要素をとると

$$\{l'^2(l'+1)^2-2l'(l'+1)l(l+1)+l^2(l+1)^2-2l'(l'+1)-2l(l+1)\}\langle l'|\hat{z}|l\rangle$$
$$=0 \tag{4.12}$$

となる．この左辺の係数は因数分解ができて，(4.12)は

$$(l'+l+2)(l'+l)(l'-l+1)(l'-l-1)\langle l'|\hat{z}|l\rangle = 0 \tag{4.13}$$

と書き直すことができる．(4.11)を利用すれば，(4.13)と全く同じ関係式が $\langle l'|\hat{x}|l\rangle$ と $\langle l'|\hat{y}|l\rangle$ についても成立する．量子数 l と l' は，$0,1,2,\cdots$ の 0 または正の整数値をとるので，$l'+l+2>0$ である．また $l'+l=0$ のときは，$l'=l=0$ であるから一般的には $\langle 0|\hat{z}|0\rangle \neq 0$ である．しかしこのとき，$\langle 0|\hat{z}|0\rangle$ は角 θ に関する積分により 0 であり，また $\langle 0|\hat{x}|0\rangle$ と $\langle 0|\hat{y}|0\rangle$ も角 φ に関する積分が消える．すなわち，$l'=l=0$ のとき，$\langle 0|\hat{x}|0\rangle=\langle 0|\hat{y}|0\rangle=\langle 0|\hat{z}|0\rangle=0$ である．したがって，$\langle l'|\hat{x}|l\rangle$, $\langle l'|\hat{y}|l\rangle$ および $\langle l'|\hat{z}|l\rangle$ の行列要素が 0 でないのは，$l'=l\pm 1$ のときだけである．すなわち，(4.1)の $|\boldsymbol{r}_{21}|^2$ が 0 でないのは，方位量子数の変化 Δl が，次の条件をみたすときだけである．

$$\Delta l = \pm 1. \tag{4.14}$$

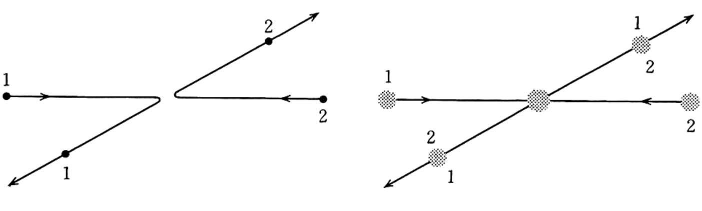
第6章

多粒子系の理論

§1 同種粒子からなる体系

(1) Bose 粒子と Fermi 粒子

量子力学的体系が，例えば電子のような同種粒子から構成されているとき，それらの粒子をたがいに識別することは不可能である．すなわち，それらの粒子のうちの2個をいれかえても，観測できるような変化は生じない．同種の粒子のいれかえによって，観測できる状態の変化がおきないことは，粒子が古典力学の法則にしたがうときでも同様である．しかし，図6.1に示すように，2個の電子を衝突させたとき，電子を古典力学の法則にしたがう粒子とみなすならば，原理的にはそれぞれの電子の軌道をいくらでも精密に追跡してゆくことができる．したがって，図6.1(a)の左から入射した電子を1，右からきたものを2と番号づけをしておけば，たとえそれらの2個の電子のもつ物理的属性が完全に同一であっても，それらの電子の軌道を精細にたどってゆくことにより，図(a)の左下に散乱された電子が電子1であり，右上に出てゆく電子が電子2であることを原理的には知ることができる．したがって，衝突後の2個の



(a) 2個の同種の古典的粒子の衝突

(b) 2個の同種の量子力学的粒子の衝突

図6.1 同種粒子の衝突

電子をいれかえたとき，すなわち，左下に電子2が，右上に電子1が出てくるとき，その状態と図(a)の状態の二つの終状態を実質的に区別できなくても，原理的にはこれらの終状態は別の状態として数えなければならない．ところが，量子力学的粒子としての電子は，粒子性と波動性を合わせもっていて，それはモヤモヤした雲のようなものである．そのはっきりしない二つの雲が，図6.1(b)のように衝突する．この二つの雲が衝突した瞬間，それらは一つの雲のかたまりとなり，やがて再び2個の雲となって分離してゆく．すると，たとえ左からきた雲を1，右からきた雲を2と名づけておいても，衝突後に分離した雲は，どちらがどっちから来たものか全く分からなくなってしまう．すなわち，図6.1(b)に示した衝突後の二つの可能な状態を区別することは原理的に不可能である．したがって，図(a)のときと違って，量子力学的粒子の場合には，これらの終状態は一つの状態として数えなければならない．上では，量子力学的粒子を雲のようなものとして描写したが，次の例のほうが物事の本質をより適切にとらえているかも知れない．すなわち，図(b)の2個の粒子を，たくさんの電球を並べた電光板上の2個の光点とみるのである．入射する2個の光点が左右から近づき，それらの光点が衝突して離れてゆく．このとき，離れてゆく2個の光点のうち，どちらが左からきたもので，どちらが右からきたものかを判断しようとするのは，それ自体意味がない．量子力学の体系には，このような原理的な識別不可能性を，矛盾なくその体系に組みこんでおく必要がある．

N 個の同種粒子からなる体系の状態関数を $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$ と表わそう．粒子が電子のようにスピンをもつときには，状態関数を記述する変数としては，それらの粒子の位置変数だけでなく，そのスピン状態を指定する変数をも考えなければならない．そこで以下では，変数 q_i は i 番目の粒子の位置 $\boldsymbol{r}_i$ とスピンの z 方向の値の両方を表わすものとする．この状態関数の時間的変動を規定するのが，Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)}{\partial t} = H\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t) \tag{1.1}$$

である．このとき状態関数は規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)|^2\,\mathrm{d}^3q_1\mathrm{d}^3q_2\cdots\mathrm{d}^3q_N = 1 \tag{1.2}$$

をみたすものとする．なお，(1.2)の q_i に関する積分は，スピン変数に関する和をも含むものとする．

量子力学的粒子のいれかえをしたとき，その前後の二つの状態が区別できず，それらを同一の状態とみるべきであるとの要請をみたすためには，状態関数 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$ にどのような条件が課せられるかを調べよう．

いま，粒子を指定する変数 $q_1, q_2, \cdots, q_N$ のうちの任意の2個，たとえば q_2 と q_3 をいれかえて，

$$(q_1, q_2, q_3, \cdots, q_N) \longrightarrow (q_1, q_3, q_2, \cdots, q_N) \equiv \mathrm{p}_{23}(q_1, q_2, q_3, \cdots, q_N) \quad (1.3)$$

としたとする．ここで p_{23} はこの置換を表わす演算を示すものである．このような置換をしたときの状態関数

$$\psi(q_1, q_3, q_2, \cdots, q_N; t) \equiv \psi(\mathrm{p}_{23}(q_1, q_2, q_3, \cdots, q_N); t) \quad (1.4)$$

は，元の状態関数 $\psi(q_1, q_2, q_3, \cdots, q_N; t)$ とは，一般に別の違う関数である．そこで，$\psi(q_1, q_2, q_3, \cdots, q_N; t)$ から新しい状態関数 $\psi(q_1, q_3, q_2, \cdots, q_N; t)$ をつくり出す演算子を P_{23} と書いて

$$\mathrm{P}_{23}\,\psi(q_1, q_2, q_3, \cdots, q_N; t) = \psi(q_1, q_3, q_2, \cdots, q_N; t) \quad (1.5)$$

と表わすことにしよう．粒子のいれかえは，上の変数の置換により表わされるから，粒子をいれかえた二つの状態が区別できないということは，上の二つの状態関数が同一の状態でなければならないことである．この要請が状態関数にどのような性質を要求するかをみるために，はじめ粒子が2個のときを考えてみよう．粒子をいれかえた状態と元の状態が同一の状態であるということは

$$\psi(q_2, q_1; t) = c\,\psi(q_1, q_2; t) \quad (1.6)$$

であるということである．ここで c は規格化条件により

$$|c| = 1 \quad (1.7)$$

でなければならない．ここで2個の粒子をもういちどいれかえる．すると

$$\mathrm{P}_{12}\mathrm{P}_{12}\,\psi(q_1, q_2; t) = \mathrm{P}_{12}\,\psi(q_2, q_1; t) = c\,\mathrm{P}_{12}\,\psi(q_1, q_2; t) = c^2\,\psi(q_1, q_2; t) \quad (1.8)$$

である．粒子を2度いれかえたら，それは何もしなかったことと同じことであるから，

$$\mathrm{P}_{12}\mathrm{P}_{12}\,\psi(q_1, q_2; t) = \psi(q_1, q_2; t) \quad (1.9)$$

である．(1.8)と(1.9)を比較すると，$c^2=1$，これより $c=\pm 1$ である．これは(1.7)の条件をみたしている．すなわち，2個の同種粒子からなる系の状態関

数は，それらの粒子のいれかえに対して，対称関数

$$\psi(q_2, q_1; t) = +\psi(q_1, q_2; t) \tag{1.10}$$

か，あるいは反対称関数

$$\psi(q_2, q_1; t) = -\psi(q_1, q_2; t) \tag{1.11}$$

のどちらかでなければならない．

そこで，自然界に実現されている状態は，粒子数のいかんにかかわらず，それらのうちの任意の2個の同種粒子のいれかえに対して，対称関数か反対称関数のどちらかで表わされる状態に限られると**仮定**する．この仮定の正否は，この仮定から導かれる結論が経験と矛盾するか否かによって決定される．そして，現在までのすべての経験事実は，この仮定が正しいことを裏付けている．

N個の粒子からなる系の状態関数$\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$は，一般に対称関数でも反対称関数のどちらでもない．その状態関数から，対称関数や反対称関数をつくるにはどうしたらよいだろうか．N個の粒子の任意のいれかえは，N個のうちの2個の粒子のいれかえを繰り返すことによってえられる．そのようないれかえの操作によってえられた新しい状態関数を，一般に$\mathrm{P}\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$と書くと，対称関数$\psi^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$によって表わされる状態は，元の状態関数$\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$から，次のようにしてつくることができる．

$$\psi^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, \cdots, q_N; t) = \frac{C}{N!}\sum_{\mathrm{p}} \mathrm{P}\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t). \tag{1.12}$$

ここで，pに関する和は，N個の変数の$N!$個の可能なすべての置換についての和を意味する．(1.12)の右辺の定数Cは規格化定数であるが，(1.12)の右辺の和のなかの状態関数はたがいに直交しているとは限らないので，その値はいまのところ未定に残している．反対称な状態関数は

$$\psi^{(\mathrm{A})}(q_1, q_2, \cdots, q_N; t) = \frac{C}{N!}\sum_{\mathrm{p}} (-1)^{\mathrm{p}} \mathrm{P}\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t) \tag{1.13}$$

によりつくられる．(1.13)の右辺の$(-1)^{\mathrm{p}}$の因子は，変数の組$(q_1, q_2, \cdots, q_N)$を$\mathrm{p}(q_1, q_2, \cdots, q_N)$の順序に並べ変えるときに，2個の変数の偶数回のいれかえでそれができるならば正，奇数回のいれかえが必要なとき負の符号をつけることを意味する．たとえば，粒子数が2個の場合には，(1.12)と(1.13)はそれぞれ

$$\psi^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2; t) = \frac{C}{2!}[\psi(q_1, q_2; t) + \psi(q_2, q_1; t)],$$

$$\psi^{(\mathrm{A})}(q_1, q_2; t) = \frac{C}{2!}[\psi(q_1, q_2; t) - \psi(q_2, q_1; t)]$$

である．これらの状態関数が q_1 と q_2 のいれかえに対して，それぞれ対称関数および反対称関数になっていることは明らかであろう．状態関数が(1.12)の対称関数で表わされる粒子を **Bose 粒子**，(1.13)の反対称関数で表わされる粒子を **Fermi 粒子**という．現在までに知られているすべての素粒子がそのいずれかに属している．光子，中間子などは Bose 粒子であり，電子，陽子，中性子などは Fermi 粒子である．なお，Bose 粒子は整数(0 も含めて)スピン，Fermi 粒子は半整数スピンをもつことが知られている．これをスピンと統計の関係といい，この関係は相対論的場の量子論により証明される．

状態関数が，ある時刻 t において対称または反対称であるとしたとき，次の瞬間でもそうであることは保証されるだろうか．仮にそうであれば，宇宙創造のとき，実現される状態は対称か反対称のどちらかの状態に限られると決めた神の意志は，未来永劫にわたって貫徹されることになる．もしそうでなければ，上のような仮説を自然法則として要請することは無意味である．初期条件として要求される条件が，時間的に保持される法則としては，例えば電磁気学における Gauss の法則

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{D} = \rho, \qquad \mathrm{div}\,\boldsymbol{B} = 0$$

をあげることができる*．状態関数の対称・反対称性が時間とともに保持されることは，(1.1)の Schrödinger 方程式を次のように表わしておけばただちに理解される．

$$\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t+\Delta t) = \left[1 + \frac{\Delta t}{i\hbar} H(q_1, q_2, \cdots, q_N)\right] \psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t). \tag{1.14}$$

ここで，右辺の状態関数 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$ は対称(反対称)関数になっているとする．N 個の粒子が同種粒子であるということは，この系のハミルトニアン

---

* 例えば，砂川重信「電磁気学」岩波書店(1987)，p. 219 を参照．

H が粒子の変数のいれかえに対して，その形を変えないことを意味する．すなわち，

$$H(q_1, q_2, \cdots, q_N) = H(\mathrm{p}(q_1, q_2, \cdots, q_N)) \tag{1.15}$$

である．したがって，(1.14)の右辺の全体は対称(反対称)関数である．すなわち，時刻 t における状態関数 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$ が対称(反対称)関数であれば，時刻 $t+\varDelta t$ における状態関数 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t+\varDelta t)$ もまた対称(反対称)関数である．こうして，ある時刻において対称(反対称)であった状態は，いつまでたっても対称(反対称)の状態に保たれる．

問 43　^{4}He の原子は，2個の中性子と2個の陽子からなる原子核と，そのまわりに分布する2個の電子から構成されている．一方，^{3}He 原子の原子核は1個の中性子と2個の陽子から構成されている．前者は Bose 粒子，後者は Fermi 粒子であることを示せ．

(2)　独立粒子近似

これまでは，同種粒子間の相互作用により全系の状態関数を各粒子の状態関数の積で表わすことのできない一般の場合を考えてきた．ここで，粒子間の相互作用が無視でき，そのため全系の状態関数を各粒子の状態関数の積で表現できる特別な場合を考えることによって，状態関数が対称か反対称に限られるという条件が，どのような物理的意味をもつかを明らかにしよう．

いま N 個の同種粒子が，ある共通の外的ポテンシャル V の作用のもとで，それぞれ独立に運動しているものとする．粒子間の相互作用を無視するこのような近似を**独立粒子近似**という．このとき，体系を記述するハミルトニアンは

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_i + V(q_i)\right] \tag{1.16}$$

で与えられる．系を構成する粒子が同種粒子であることは，(1.16)のハミルトニアンのなかのすべての粒子の質量 m が同一であり，またポテンシャル関数 $V(q_i)$ の関数形がすべての粒子に対して共通であるということに反映されている．このとき(1.15)の関係がみたされている．ここで(1.16)で記述される系の定常状態を考えると，その状態は，それぞれの粒子に関する固有値方程式

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_i + V(q_i)\right]\phi_m(q_i) = E_m\phi(q_i) \tag{1.17}$$

の解である固有関数 $\phi_m(q_i)$ の積

$$\phi_{m,n,\cdots,r}(q_1, q_2, \cdots, q_N) = \phi_m(q_1)\phi_n(q_2)\cdots\phi_r(q_N) \tag{1.18}$$

で表わされ，また全系のエネルギー固有値は

$$E = E_m + E_n + \cdots + E_r \tag{1.19}$$

で与えられる．なお，(1.18)はまだ粒子のいれかえに対して，対称関数にも反対称関数にもなっていないことに注意しよう．

はじめ Bose 粒子系の場合を考えよう．この場合には，(1.18)の固有関数を(1.12)の手続きにしたがって対称化する．それには，(1.18)の量子数の組 $(m, n, \cdots, r)$ を固定しておいて，粒子を指定する変数 $(q_1, q_2, \cdots, q_N)$ に対して可能なすべての置換をほどこして，えられた $N!$ 個の関数の和をとればよい．すなわち

$$\phi_{m,n,\cdots,r}^{(S)}(q_1, q_2, \cdots, q_N) = \frac{C}{N!}\sum_{P} P[\phi_m(q_1)\phi_n(q_2)\cdots\phi_r(q_N)]. \tag{1.20}$$

これが Bose 粒子系を記述する対称化された固有関数である．ここで話をより具体化するために，3粒子系を考えよう．3粒子系は多体系の本質を反映するもっとも簡単な系だからである．この場合に(1.20)の右辺を書き出すと，それは $3!=6$ 個の項の和として，次のように表わされる．

$$\begin{aligned}\phi_{m,n,r}^{(S)}(q_1, q_2, q_3) = \frac{C}{3!}[&\phi_m(q_1)\phi_n(q_2)\phi_r(q_3) + \phi_m(q_1)\phi_n(q_3)\phi_r(q_2) \\ &+ \phi_m(q_2)\phi_n(q_1)\phi_r(q_3) + \phi_m(q_2)\phi_n(q_3)\phi_r(q_1) \\ &+ \phi_m(q_3)\phi_n(q_1)\phi_r(q_2) + \phi_m(q_3)\phi_n(q_2)\phi_r(q_1)].\end{aligned} \tag{1.21}$$

(1.16)の各粒子のハミルトニアンはみな同形であるから，(1.18)のそれぞれの粒子の固有関数を指定する量子数 $(m, n, \cdots, r)$ のとる値は，すべて同じ数値の組のなかのどれかである．一般には量子数のとる値の数は無限個なので，その可能な値を低い値から順次に $k_1, k_2, k_3, \cdots, k_\infty$ と書いておく．表6.1は，粒子数が3個のとき，1番目の粒子が $m=k_2$，2番目の粒子が $n=k_2$，3番目が $r=k_4$ の値をとるとき，すなわち固有関数が $\phi_{k_2}(q_1)\phi_{k_2}(q_2)\phi_{k_4}(q_3)$ で与えられる場合を表わしている．この場合，(1.21)は

表6.1　3個の同種粒子の占める状態. $\sum_{i=1}^{\infty} n_i = 3$.

q_1	q_2	q_3	
m	n	r	
k_1	k_1	k_1	$n_1=0$
(k_2)	(k_2)	k_2	$n_2=2$
k_3	k_3	k_3	$n_3=0$
k_4	k_4	(k_4)	$n_4=1$
k_5	k_5	k_5	$n_5=0$
⋮	⋮	⋮	⋮
k_∞	k_∞	k_∞	$n_\infty=0$

$$
\begin{aligned}
\phi_{k_2,k_2,k_4}{}^{(\mathrm{S})}(q_1,q_2,q_3) = \frac{C}{3!}\Big[&\{\phi_{k_2}(q_1)\phi_{k_2}(q_2)+\phi_{k_2}(q_2)\phi_{k_2}(q_1)\}\phi_{k_4}(q_3)\\
&+\{\phi_{k_2}(q_1)\phi_{k_2}(q_3)+\phi_{k_2}(q_3)\phi_{k_2}(q_1)\}\phi_{k_4}(q_2)\\
&+\{\phi_{k_2}(q_2)\phi_{k_2}(q_3)+\phi_{k_2}(q_3)\phi_{k_2}(q_2)\}\phi_{k_4}(q_1)\Big]
\end{aligned}
\tag{1.22}
$$

である．ここで右辺を中括弧{ }でくくった理由はあとで説明する．(1.22)の右辺をみて，この表式を書き下すには，次のようにすればよい．まず，量子数がk_2の値をとる粒子数($n_2=2$)に等しい数の固有関数と，量子数の値がk_4の粒子数($n_4=1$)に等しい数の固有関数の積$\phi_{k_2}(\ )\cdot\phi_{k_2}(\ )\cdot\phi_{k_4}(\ )$をとり，その空欄のなかに3個の変数$q_1, q_2$および$q_3$を可能なすべての順序で書きこんで，それらを加え合わせればよい．つまり，対称化された固有関数(1.22)の形は，どの粒子がどの状態にあるかには関係なく，量子数の値の組($k_1, k_2, k_3, \cdots, k_\infty$)のそれぞれの値をとる粒子の個数$n_1, n_2, n_3, \cdots, n_\infty$を指定するだけで決まってしまう．このことは，まさに粒子が区別できないことを反映している．

ここで，(1.20)の未定の規格化定数Cを決定しておこう．それには

$$
\int_{-\infty}^{\infty}\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{S})*}(q_1,q_2,\cdots,q_N)\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{S})}(q_1,q_2,\cdots,q_N)\mathrm{d}^3q_1\mathrm{d}^3q_2\cdots\mathrm{d}^3q_N = 1
\tag{1.23}
$$

の規格化条件を利用する．なお，個々の粒子の固有関数$\phi_m(q)$はすでに直交規格化されているものとする．(1.20)の複素共役をとり，それを(1.23)の左辺に代入し，$\mathrm{d}^3q_1\mathrm{d}^3q_2\cdots\mathrm{d}^3q_N \equiv \mathrm{d}^{3N}q$と書くと，

$$1 = \frac{C^*}{N!}\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m{}^*(q_1)\phi_n{}^*(q_2)\cdots\phi_r{}^*(q_N)\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, \cdots, q_N)\mathrm{d}^{3N}q$$
$$+\frac{C^*}{N!}\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m{}^*(q_2)\phi_n{}^*(q_1)\cdots\phi_r{}^*(q_N)\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, \cdots, q_N)\mathrm{d}^{3N}q$$
$$+\cdots\cdots \tag{1.24}$$

となる．(1.20)の右辺の項数 $N!$ に対応して，(1.24)の右辺の項数も $N!$ である．まずはじめ，N 個の粒子のとる量子数の値が全部異なる場合を考えよう．このとき(1.24)の右辺の第1項の $\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{S})}$ に(1.20)を代入して積分すると，(1.20)の右辺の $N!$ の和のうちで残るのは，左側の複素共役をとった固有関数の積と粒子の配置 $(q_1, q_2, \cdots, q_N)$ が全く同一の $\phi_m(q_1)\phi_n(q_2)\cdots\phi_r(q_N)$ の項だけで，その他の項は各粒子の固有関数の直交性によって消えてしまう．同様に，(1.24)の右辺の第2項の $\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{S})}$ のなかで残るのは $\phi_m(q_2)\phi_n(q_1)\cdots\phi_r(q_N)$ の項だけである．したがって，すべての量子数の値が異なるとき，(1.24)の右辺の値は $(C^*/N!)\times(C/N!)\times N!$ となる．最後の $N!$ は(1.24)の右辺の項数である．次に，N 個の粒子の量子数 $m, n, \cdots, r$ のうち，n_1 個が同じ値 k_1 をとり，n_2 個が k_2 の値をとるという具合になっているときには，(1.24)の右辺の各項で残る項の数は $n_1!\times n_2!\times n_3!\times\cdots\times n_\infty!$ 個である．このことは，3粒子系の例の(1.22)の右辺の $\{\cdots\}$ のなかには，全く同じ関数が $2!$ 個含まれていることからも分かる．したがって，(1.24)の右辺の各項の $\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{S})}$ のうちで残る数は $n_1!\times n_2!\times\cdots\times n_\infty!$ 個である．これに前の値 $|C|^2(N!)^{-2}\cdot N!$ を掛けると，(1.24)の条件は

$$1 = |C|^2(N!)^{-2}\cdot N!\times(n_1!\times n_2!\times\cdots\times n_\infty!)$$

となる．ここで $0!=1$ であり，また $N=n_1+n_2+\cdots+n_\infty$ である．定数 C を実数に選ぶと，$C=\sqrt{N!}/\sqrt{n_1!\,n_2!\cdots n_\infty!}$ をえる．これを(1.20)に代入すると

$$\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, \cdots, q_N) = \frac{1}{\sqrt{N!\cdot n_1!\,n_2!\cdots n_\infty!}}\sum_{\mathrm{P}}\mathrm{P}[\phi_m(q_1)\phi_n(q_2)\cdots\phi_r(q_N)] \tag{1.25}$$

となる．(1.22)の3粒子系のときには，$C=\sqrt{3!}/\sqrt{0!2!0!1!\cdots0!}=\sqrt{6}/\sqrt{2}$ であり，また $N=2$ で $m\neq n$ のときには，

$$\phi_{m,n}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_m(q_1)\phi_n(q_2) + \phi_m(q_2)\phi_n(q_1)], \tag{1.26}$$

$m=n=k$ のとき

$$\begin{aligned}\phi_{k,k}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2) &= \frac{1}{\sqrt{2!\cdot 0!\cdots 2!\cdots 0!}}[\phi_k(q_1)\phi_k(q_2) + \phi_k(q_1)\phi_k(q_2)] \\ &= \phi_k(q_1)\phi_k(q_2)\end{aligned} \tag{1.27}$$

である．なお，(1.22)および(1.27)の例からも分かるように，Bose 粒子は同一の状態に何個でもはいることができる．これが Bose 粒子系の特徴である．同一の状態に巨視的な数の粒子がはいっているとき，これを **Bose-Einstein 凝縮**といい，液体ヘリウムなどが超流動現象をおこす原因は，これにあると考えられている．

次に Fermi 粒子系を考える．このとき，(1.13)の右辺に(1.18)を代入して

$$\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{A})}(q_1, q_2, \cdots, q_N) = \frac{C}{N!}\sum_{\mathrm{P}}(-1)^{\mathrm{P}}\mathrm{P}[\phi_m(q_1)\phi_n(q_2)\cdots\phi_r(q_N)] \tag{1.28}$$

である．3粒子系のとき，(1.28)は

$$\begin{aligned}\phi_{m,n,r}{}^{(\mathrm{A})}(q_1, q_2, q_3) = \frac{C}{3!}[&\phi_m(q_1)\phi_n(q_2)\phi_r(q_3) - \phi_m(q_1)\phi_n(q_3)\phi_r(q_2) \\ &-\phi_m(q_2)\phi_n(q_1)\phi_r(q_3) + \phi_m(q_2)\phi_n(q_3)\phi_r(q_1) \\ &+\phi_m(q_3)\phi_n(q_1)\phi_r(q_2) - \phi_m(q_3)\phi_n(q_2)\phi_r(q_1)]\end{aligned} \tag{1.29}$$

である．この表式から，3個の量子数 m, n, r のうちのどれか二つの値が等しいとき，例えば $m=n$ のとき $\phi_{m,m,r}{}^{(\mathrm{A})}(q_1, q_2, q_3)=0$ となる．一般に(1.28)の N 個の量子数 $m, n, \cdots, r$ のうちのどれか2個のとる値が等しいとき，(1.28)の状態関数は0である．すなわち，Fermi 粒子は同一の状態にたかだか1個しか存在しえない．これを **Pauli の排他律**という．この原理を用いると，同じスピン状態にある電子は，原子内の同一軌道上にただ1個しか存在しえないことになる．これが物体が特定の大きさをもつことができる最大の原因となっている．また，この原理にもとづいて，原子核，分子および固体などの多くの性質が説明される．

最後に，(1.28)の右辺の規格化定数 C を決めておこう．それには，Bose 粒子系のときと同様に，規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{A})*}(q_1,q_2,\cdots,q_N)\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{A})}(q_1,q_2,\cdots,q_N)\mathrm{d}^3q_1\mathrm{d}^3q_2\cdots\mathrm{d}^3q_N=1 \tag{1.30}$$

を利用する．(1.28)の複素共役をとり，(1.30)に代入すると，(1.24)のときと同様に，(1.30)の左辺は $N!$ 個の項に分解される．すなわち，

$$\begin{aligned}1=&\frac{C^*}{N!}\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m{}^*(q_1)\phi_n{}^*(q_2)\cdots\phi_r{}^*(q_N)\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{A})}(q_1,q_2,\cdots,q_N)\mathrm{d}^{3N}q\\&-\frac{C^*}{N!}\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m{}^*(q_2)\phi_n{}^*(q_1)\cdots\phi_r{}^*(q_N)\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{A})}(q_1,q_2,\cdots,q_N)\mathrm{d}^{3N}q\\&+\cdots\cdots.\end{aligned} \tag{1.31}$$

Pauliの排他律により，すべての量子数 $m,n,\cdots,r$ はみな異なる値をとるから，(1.31)の右辺の各項に(1.28)を代入すると，残るのは左側の複素共役の因子と同じ状態関数の積の項だけである．その残る項の前の符号は，左側の複素共役の因子の前の符号と同じであるから，(1.31)の $N!$ 個の各項の前の符号はすべてプラスとなる．したがって，(1.31)の右辺の値は $(C^*/N!)\times(C/N!)\times N!$ に等しい．これが1に等しいことから，$C=\sqrt{N!}$ と選ぶことができる．これを(1.28)に代入すると，行列式を用いて

$$\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{A})}(q_1,q_2,\cdots,q_N)=\frac{1}{\sqrt{N!}}\begin{vmatrix}\phi_m(q_1)&\phi_m(q_2)&\cdots&\phi_m(q_N)\\\phi_n(q_1)&\phi_n(q_2)&\cdots&\phi_n(q_N)\\\vdots&\vdots&&\vdots\\\phi_r(q_1)&\phi_r(q_2)&\cdots&\phi_r(q_N)\end{vmatrix} \tag{1.32}$$

と表わすことができる．これを**Slaterの行列式**という．(1.32)の形に表わしておけば，Fermi粒子の場合に，量子数 $m,n,\cdots,r$ のうちのどれか2個が等しい値をとるとき，状態関数 $\phi_{m,n,\cdots,r}{}^{(\mathrm{A})}$ が0になることが一目瞭然となる．

(3) 状態関数の対称化の必要性

地球上の電子1のハミルトニアンが

$$H^{(1)}=-(\hbar^2/2m)\triangle_1+V(|\boldsymbol{q}_1|) \tag{1.33}$$

であり，その固有関数は

$$H^{(1)}\phi_m(\boldsymbol{q}_1)=E_m\phi_m(\boldsymbol{q}_1) \tag{1.34}$$

で与えられるものとする．ここで $\boldsymbol{q}_1$ は，図6.2に示すように，地球上の原点

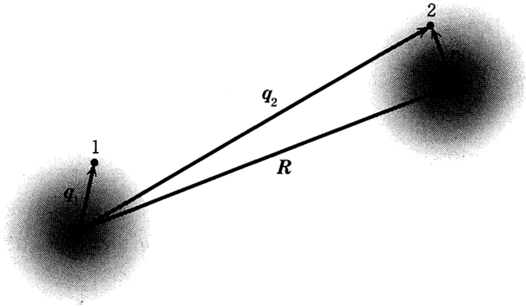


図6.2　地球上の電子と太陽上の電子

Oから測った電子1の位置ベクトルである*．この電子の時刻 t における状態関数を $\psi(\boldsymbol{q}_1, t)$ としたとき，固有状態 $\phi_m(\boldsymbol{q}_1)$ にその電子を発見する確率は

$$w_m(t) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m{}^*(\boldsymbol{q}_1)\psi(\boldsymbol{q}_1, t)\mathrm{d}^3 q_1 \right|^2 \tag{1.35}$$

で与えられる．

ここで問題にするのは，(1.35)の確率を求めるに当って，図6.2の太陽S上の電子2の存在を考慮して，状態関数を反対称化しておく必要があるだろうかということである．いま，太陽上の電子2が太陽上の物体からうける相互作用のポテンシャルを $U(\boldsymbol{r}_2)$ とすると，そのハミルトニアン $H^{(2)}$ は

$$H^{(2)} = -(\hbar^2/2m)\triangle_2 + U(|\boldsymbol{r}_2|) \tag{1.36}$$

と表わされる．ここで $\boldsymbol{r}_2$ は，図6.2にあるように，太陽上の原点Sから測った電子2の位置ベクトルであり，それを地球上の原点Oから測った位置ベクトル $\boldsymbol{q}_2$ とは，$\boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{q}_2 - \boldsymbol{R}$ の関係にある．ここで $\boldsymbol{R}$ はOからSに引いた一定のベクトルである．電子2の固有状態は

$$H^{(2)}\chi_s(\boldsymbol{r}_2) = E_s \chi_s(\boldsymbol{r}_2) \tag{1.37}$$

の解で与えられる．

太陽上の電子と地球上の電子の間の相互作用は当然無視できるが，このとき全系のハミルトニアンが $H^{(1)} + H^{(2)}$ で与えられるとするわけにはいかない．なぜなら，

---

*　簡単のため，電子のスピン自由度は無視する．

$$H^{(1)}+H^{(2)} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_1+V(|\boldsymbol{q}_1|)\right]+\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_2+U(|\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{R}|)\right]$$

は2個の電子のいれかえ $\boldsymbol{q}_1\longleftrightarrow\boldsymbol{q}_2$ に対して対称ではないからである．全系のハミルトニアンを対称にするには，太陽から地球上の電子1に作用する相互作用 $U(|\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{R}|)$ と，地球上の物体が太陽上の電子2にはたらく相互作用 $V(|\boldsymbol{q}_2|)$ をもとりいれておく必要がある．このとき，全系のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} H &= H^{(1)'}+H^{(2)'} \\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_1+V(|\boldsymbol{q}_1|)+U(|\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{R}|)\right]+\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_2+U(|\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{R}|)+V(|\boldsymbol{q}_2|)\right] \end{aligned}$$

で与えられる．このハミルトニアンが $\boldsymbol{q}_1\longleftrightarrow\boldsymbol{q}_2$ のいれかえに対して対称になっているのは明らかである．したがって，全系のハミルトニアンの固有関数は，うえの $H^{(1)'}$ と $H^{(2)'}$ の固有関数の積で与えられる．しかし，電子1が地球上にあり，電子2が太陽上にあるとき，実質的には，うえに追加した相互作用 $U(|\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{R}|)$ と $V(|\boldsymbol{q}_2|)$ を無視して，全系の固有関数を(1.34)と(1.37)の固有関数の積 $\phi_m(\boldsymbol{q}_1)\chi_s(\boldsymbol{r}_2)$ で与えてよい．この固有関数を反対称化すると

$$\phi_{m,s}{}^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_m(\boldsymbol{q}_1)\chi_s(\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{R})-\phi_m(\boldsymbol{q}_2)\chi_s(\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{R})\right] \tag{1.38}$$

となる．このとき注意すべきことは，2個の電子の位置ベクトルを交換するとき，同一の原点Oから測った位置ベクトル $\boldsymbol{q}_1$ と $\boldsymbol{q}_2$ をいれかえるべきであって，$\boldsymbol{q}_1\longleftrightarrow\boldsymbol{r}_2$ としてはならないことである．また，時刻 t に電子1が状態 $\psi(\boldsymbol{q}_1,t)$ に，また電子2が状態 $\chi(\boldsymbol{r}_2,t)$ にあるとき，全系の状態関数は $\psi(\boldsymbol{q}_1,t)\chi(\boldsymbol{r}_2,t)$ で与えられ，これを反対称化すると，(1.38)と同様に

$$\psi^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2;t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\psi(\boldsymbol{q}_1,t)\chi(\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{R},t)-\psi(\boldsymbol{q}_2,t)\chi(\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{R},t)\right] \tag{1.39}$$

である．状態 $\psi^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2;t)$ において，状態 $\phi_{m,s}{}^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2)$ を発見する確率振幅は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_{m,s}{}^{(\mathrm{A})*}(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2)\psi^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2;t)\mathrm{d}^3q_1\mathrm{d}^3q_2 \tag{1.40}$$

で与えられる．

さて，(1.40)に(1.38)と(1.39)を代入し，また状態関数 χ を固有関数 χ_s で

展開し

$$\chi(\boldsymbol{r},t) = \sum_r C_r(t)\chi_r(\boldsymbol{r})$$

と表わすと，

$$\begin{aligned}(1.40) = {} & \frac{1}{2}\sum_r C_r(t)\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m{}^*(\boldsymbol{q}_1)\psi(\boldsymbol{q}_1,t)\mathrm{d}^3q_1\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\chi_s^*(\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{R})\chi_r(\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{R})\mathrm{d}^3q_2 \\ & -\frac{1}{2}\sum_r C_r(t)\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m{}^*(\boldsymbol{q}_1)\chi_r(\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{R})\mathrm{d}^3q_1\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\chi_s^*(\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{q}_2,t)\mathrm{d}^3q_2 \\ & -\frac{1}{2}\sum_r C_r(t)\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m{}^*(\boldsymbol{q}_2)\chi_r(\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{R})\mathrm{d}^3q_2\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\chi_s^*(\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{R})\psi(\boldsymbol{q}_1,t)\mathrm{d}^3q_1 \\ & +\frac{1}{2}\sum_r C_r(t)\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m{}^*(\boldsymbol{q}_2)\psi(\boldsymbol{q}_2,t)\mathrm{d}^3q_2\cdot\int_{-\infty}^{\infty}\chi_s^*(\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{R})\chi_r(\boldsymbol{q}_1-\boldsymbol{R})\mathrm{d}^3q_1\end{aligned} \tag{1.41}$$

となる．ここで右辺の第1項と第4項で $\boldsymbol{q}-\boldsymbol{R}=\boldsymbol{r}$ とおくと

$$\int_{-\infty}^{\infty}\chi_s^*(\boldsymbol{r})\chi_r(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r = \delta_{r,s} \tag{1.42}$$

であり，また第2項と第3項では

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m{}^*(\boldsymbol{q})\chi_r(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{R})\mathrm{d}^3q = 0 \tag{1.43}$$

である．これは，図6.2にあるように，固有関数 $\phi_m(\boldsymbol{q})$ は原点Oを中心として分布しており，一方，$\chi_r(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{R})=\chi_r(\boldsymbol{r})$ は太陽上の原点Sを中心としてひろがっている関数であって，これらの関数の間に重なり合う部分がないからである．(1.42)と(1.43)を用い，また第4項の積分変数の $\boldsymbol{q}_1$ と $\boldsymbol{q}_2$ をいれかえると，(1.40)は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\phi_{m,s}{}^{(\mathrm{A})*}(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2)\psi^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2;t)\mathrm{d}^3q_1\mathrm{d}^3q_2 = C_s(t)\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m{}^*(\boldsymbol{q}_1)\psi(\boldsymbol{q}_1,t)\mathrm{d}^3q_1$$

となる．したがって，状態 $\psi^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2;t)$ において，固有状態 $\phi_{m,s}{}^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2)$ を発見する確率は

$$w_{m,s}(t) = \left|C_s(t)\int_{-\infty}^{\infty}\phi_m{}^*(\boldsymbol{q}_1)\psi(\boldsymbol{q}_1,t)\mathrm{d}^3q_1\right|^2 \tag{1.44}$$

で与えられる．

地球上で実験をしている人間は，太陽上の電子の状態について何も知らない．

したがって，地球上の電子の状態の転移確率を求めるには，(1.44)の太陽上の電子の量子数 s に関する和をとればよい．すなわち

$$w_m(t) = \sum_s w_{m,s}(t) = \sum_s |C_s(t)|^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(\boldsymbol{q}_1)\psi(\boldsymbol{q}_1, t)\mathrm{d}^3 q_1 \right|^2$$

$$= \left| \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(\boldsymbol{q}_1)\psi(\boldsymbol{q}_1, t)\mathrm{d}^3 q_1 \right|^2. \tag{1.45}$$

ここで規格化条件 $\sum_s |C_s(t)|^2 = 1$ を用いている．(1.45)の結果は(1.35)と完全に一致している．すなわち，地球上の物理学者は，太陽や火星の上の電子の存在に気を配りながらその転移確率を計算しなくてもよいのである．一般に粒子の状態関数に重なり合いがないときには，状態関数を対称化(反対称化)する必要はない．

問 44　原子内の 2 個の電子がともに上向きのスピンをもち，そのうちの 1 個は状態 $\phi_a(\boldsymbol{r})$ を，他方は状態 $\phi_b(\boldsymbol{r})$ を占めている．この系の全体の状態関数を記し，それを用いて，2 個の電子が同じ位置に存在する確率が 0 であることを示せ．

問 45　質量 m，固有角振動数 ω_0 の 2 個の全く同じ 1 次元の調和振動子が，相互作用ポテンシャル $V=gxy$ で結合している．これらの粒子が Bose 粒子のときと，Fermi 粒子のときのエネルギー固有値を求めよ．なおここで，x と y はそれぞれの粒子の位置座標であり，また $m\omega_0^2 > g$ とする．

§2　ヘリウム原子

電子の状態関数の反対称性が重要な役割を果すもっとも簡単な例としてヘリウム原子の固有状態を考えよう．ヘリウム原子は，電子の 2 倍の大きさの正電荷をもつ原子核のまわりに，2 個の電子が存在する系である．なお，ここでは原子核は重くて原点 O に静止しているものとする．このとき，系のハミルトニアンは

$$H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_1 - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1}\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_2 - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2}\right) + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}} \tag{2.1}$$

で与えられる．ここで $\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ は，それぞれ 1 番目と 2 番目の電子の原点 O から測った位置ベクトルである．また(2.1)の第 3 項は，電子間の斥力ポテンシャルであり，$r_{12} = |\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|$ である．(2.1)のハミルトニアンはスピン演算子を含まないので，Schrödinger の固有値方程式

$$H\psi = E\psi \tag{2.2}$$

の解は，スピン変数による部分 χ を分離して

$$\psi = \phi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\cdot\chi \tag{2.3}$$

と表わすことができる．

ここではとりあえず，電子間の斥力を与える(2.1)の右辺の第3項を摂動項とみなして，摂動論を用いてヘリウム原子のエネルギー固有値を求めよう．この斥力ポテンシャルの大きさは，原子核と電子との間の引力ポテンシャルと同程度の大きさの量であるから，このような取り扱いは本当は合理的であるとはいえないが，それでも問題の物理的性格を理解するのには十分に役立つのである．より合理的な方法は変分法を用いる方法であるが，これについては次の節で説明する．

さて，非摂動系の固有関数 $\phi^{(0)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ と，そのエネルギー固有値 $E^{(0)}$ は，水素型の原子の固有値方程式

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi_n(\boldsymbol{r}) = E_n\psi_n(\boldsymbol{r}) \tag{2.4}$$

の解を用いて，次式で与えられる．

$$\phi^{(0)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi_n(\boldsymbol{r}_1)\cdot\psi_{n'}(\boldsymbol{r}_2)\,; \quad E^{(0)} = E_n + E_{n'}. \tag{2.5}$$

ここで n は3個の量子数 (n, l, m) をまとめて表わしたものである．(2.5)で $n' \neq n$ のとき，$\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ を交換してえられる固有状態 $\psi_n(\boldsymbol{r}_2)\cdot\psi_{n'}(\boldsymbol{r}_1)$ もまた同じエネルギー固有値 $E^{(0)}$ に属する固有関数になっている．これは，同種粒子系の場合につねに現われる縮退であり，これを**交換縮退**という．したがって，第0近似の固有関数は，第5章(1.34)により

$$\phi^{(0)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = a\psi_n(\boldsymbol{r}_1)\psi_{n'}(\boldsymbol{r}_2) + b\psi_n(\boldsymbol{r}_2)\psi_{n'}(\boldsymbol{r}_1) \tag{2.6}$$

で与えられる．ここで a と b は未定の定数である．用いる方法は，第5章§1の(3)の縮退のある場合の摂動論である．(2.2)のエネルギー固有値を摂動展開して，第1近似までとり

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} \tag{2.7}$$

とおき，これを固有値方程式に代入し，固有関数に関しては第0近似まで残すと

$$(E^{(1)} - V)\phi^{(0)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = 0$$

がえられる．ここで $V=e^2/4\pi\varepsilon_0 r_{12}$ である．これに(2.6)の $\phi^{(0)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ を代入して，$\psi_n{}^*(\boldsymbol{r}_1)\psi_{n'}{}^*(\boldsymbol{r}_2)$ および $\psi_n{}^*(\boldsymbol{r}_2)\psi_{n'}{}^*(\boldsymbol{r}_1)$ を掛けて積分し，(2.4)の解の直交規格化性を利用すると，連立方程式

$$a(J_{n,n'}-E^{(1)})+bK_{n,n'}=0,$$
$$aK_{n',n}+b(J_{n',n}-E^{(1)})=0 \tag{2.8}$$

がえられる．ここで

$$J_{n,n'}=\int_{-\infty}^{\infty}|\psi_n(\boldsymbol{r}_1)|^2\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}|\psi_{n'}(\boldsymbol{r}_2)|^2\mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2,$$
$$K_{n,n'}=\int_{-\infty}^{\infty}\psi_n{}^*(\boldsymbol{r}_1)\psi_{n'}(\boldsymbol{r}_1)\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}\psi_{n'}{}^*(\boldsymbol{r}_2)\psi_n(\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2 \tag{2.9}$$

である．(2.9)の表式より明らかに $J_{n,n'}=J_{n',n}$，$K_{n,n'}=K_{n',n}$ である．状態関数が $\psi_n(\boldsymbol{r})$ で与えられる電子は，電荷密度 $e|\psi_n(\boldsymbol{r})|^2$ で原子内に分布している．したがって(2.9)の $J_{n,n'}$ は，それぞれ状態 n と n' にある 2 個の電子の雲の間の Coulomb エネルギー(＞0)を表わしている．一方，$K_{n,n'}$ は古典的な解釈を与えることのできない量で，電子の状態の交換により現われるものであるから，これを**交換積分**または**交換エネルギー**という．この種の交換積分は，2 個の水素原子間の相互作用にも現われ，これが水素分子の共有結合の原因となる．さて，$\rho(\boldsymbol{r})\equiv e\psi_{n'}{}^*(\boldsymbol{r})\psi_n(\boldsymbol{r})$ とおき，また

$$\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r}_2)=\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho(\boldsymbol{r}_1)}{r_{12}}\mathrm{d}^3r_1$$

と書くと，$\triangle\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r})=-\rho(\boldsymbol{r})/\varepsilon_0$ であるから，(2.9)の交換積分は

$$K_{n,n'}=\int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r})\rho^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r=-\varepsilon_0\int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r})\triangle\boldsymbol{\Phi}^*(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r$$
$$=\varepsilon_0\int_{-\infty}^{\infty}|\mathrm{grad}\,\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{r})|^2\mathrm{d}^3r\geqq 0 \tag{2.10}$$

と表わすことができる．すなわち，交換積分の値は負にはならない．

連立方程式(2.8)が 0 以外の解をもつとき

$$\begin{vmatrix} J_{n,n'}-E^{(1)} & K_{n,n'} \\ K_{n,n'} & J_{n,n'}-E^{(1)} \end{vmatrix}=0$$

である．これより

$$E^{(1)} = J_{n,n'} \pm K_{n,n'}.$$

これらの固有値に対応する(2.8)の解はそれぞれ $b=\pm a$ である．ここで固有関数 $\phi^{(0)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ の規格化条件を考慮すると，第0近似の固有関数として

$$\phi_{\pm}{}^{(0)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = (1/\sqrt{2})[\psi_n(\boldsymbol{r}_1)\psi_{n'}(\boldsymbol{r}_2) \pm \psi_{n'}(\boldsymbol{r}_1)\psi_n(\boldsymbol{r}_2)] \tag{2.11}$$

がえられる．また，それぞれの固有状態のエネルギー固有値は

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} = E_n + E_{n'} + J_{n,n'} \pm K_{n,n'} \tag{2.12}$$

で与えられる．

ここで $n'=n$ のときには縮退はない．したがって，このときの第0近似の固有関数は

$$\phi^{(0)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \psi_n(\boldsymbol{r}_1)\psi_n(\boldsymbol{r}_2) \tag{2.13}$$

であり，第1近似のエネルギーの補正項は $E^{(1)}=J_{n,n}$ である．したがって，エネルギー固有値は

$$E = E^{(0)} + E^{(1)} = 2E_n + J_{n,n} \tag{2.14}$$

で与えられる．

次に電子のスピン関数 χ を考えよう．2電子系の合成スピン $\boldsymbol{s}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2$ の $\boldsymbol{s}^2$ と s_z の同時固有関数は，第4章(3.22)に与えたように，$j=0$，$m=0$ のとき

$$\chi_{0,0} = (1/\sqrt{2})(\alpha_1\beta_2 - \beta_1\alpha_2) \tag{2.15}$$

であり，$j=1$，$m=0, \pm 1$ のとき，それぞれ

$$\chi_{1,1} = \alpha_1\alpha_2, \quad \chi_{1,0} = (1/\sqrt{2})(\alpha_1\beta_2 + \beta_1\alpha_2), \quad \chi_{1,-1} = \beta_1\beta_2 \tag{2.16}$$

である．(2.15)の1重状態は2電子のスピンのいれかえに対して反対称であり，(2.16)の3重状態は対称である．

Fermi 粒子である電子の状態関数は，電子のいれかえに対して反対称でなければならない．そこで(2.11)，(2.13)および(2.15)と(2.16)をみると，$n'=n$ のとき反対称な固有関数は

$$\psi^{(\mathrm{A})} = \psi_n(\boldsymbol{r}_1)\psi_n(\boldsymbol{r}_2)\chi_{0,0} \tag{2.17}$$

で，そのエネルギー固有値は(2.14)で与えられる．$n' \neq n$ のときには，次の二通りの組み合わせがある．すなわち

$$\begin{aligned} \psi_{\mathrm{P}}{}^{(\mathrm{A})} &= (1/\sqrt{2})[\psi_n(\boldsymbol{r}_1)\psi_{n'}(\boldsymbol{r}_2) + \psi_{n'}(\boldsymbol{r}_1)\psi_n(\boldsymbol{r}_2)]\chi_{0,0}, \\ E &= E_n + E_{n'} + J_{n,n'} + K_{n,n'} \end{aligned} \tag{2.18}$$

および

$$\psi_O{}^{(A)} = (1/\sqrt{2})[\psi_n(\boldsymbol{r}_1)\psi_{n'}(\boldsymbol{r}_2)-\psi_{n'}(\boldsymbol{r}_1)\psi_n(\boldsymbol{r}_2)]\times\begin{Bmatrix}\chi_{1,1}\\ \chi_{1,0}\\ \chi_{1,-1}\end{Bmatrix},$$

$$E = E_n+E_{n'}+J_{n,n'}-K_{n,n'}. \tag{2.19}$$

(2.18)の1重状態 $\psi_P{}^{(A)}$ を**パラ状態**，(2.19)の3重状態 $\psi_O{}^{(A)}$ を**オルト状態**という．(2.18)と(2.19)のエネルギー固有値をみれば分かるように，オルト状態のヘリウム原子は，パラ状態のヘリウム原子よりもエネルギーの値が $2K_{n,n'}$ だけ低い．オルト状態では，(2.19)にみるように固有関数の空間部分が反対称関数であり，したがって2個の電子が近づいている確率が小さく，そのために電子間の Coulomb の斥力があまりきかない．それに対してパラ状態(2.18)では，固有関数の空間部分の重なり合う部分が大きく，そのために Coulomb 斥力の効果が大きくきいて，エネルギーの値が高くなるのである．

ここで，ヘリウム原子の基底状態のエネルギー固有値 E_G を(2.14)を用いて計算しておこう．$n=1$ ととると

$$E_G = 2E_1+J_{1,1}$$

である．水素型原子の基底状態のエネルギー固有値は，第3章(4.14)より

$$E_1 = E_{1,0,0} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 = -\frac{(Ze)^2}{8\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{a_0} \tag{2.20}$$

で与えられ，また(2.9)と第3章(4.23)により

$$J_{1,1} = \left(\frac{Z^3}{\pi a_0{}^3}\right)^2\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-2Z(r_1+r_2)/a_0}\frac{1}{r_{12}}d^3r_1d^3r_2$$
$$= (5/4)\cdot Ze^2/8\pi\varepsilon_0 a_0 \tag{2.21}$$

をえる．したがって

$$E_G = -(e^2/8\pi\varepsilon_0 a_0)\cdot[2Z^2-(5/4)Z]$$

である．ここで $Z=2$ とおくと

$$E_G = -13.6\times(11/2) = -74.8\,\text{eV}. \tag{2.22}$$

実測値は $E_G=-78.9\,\text{eV}$ で，(2.22)の値はかなりよく合っているといえる．なお，次節でやるように，変分法を用いればよりよい値がえられる．

問46　(2.21)の積分を実行せよ．

§3 変 分 法

われわれが研究対象とする物理系は，ほとんどの場合に多粒子系である．水素原子以外のすべての原子は2個以上の電子を含んでいる．また分子や原子核も多粒子系である．物性物理学で研究対象となる固体などにいたっては，$N \cong 10^{23}$個もの多粒子系である．このように考えると，物理学とは多体問題であるといっても過言ではない．そこで，そのような複雑な多体問題を何らかの近似法を用いて解くことが要求されるが，その近似法は考えている物理系の本質を正しくとらえたものでなくてはならない．その意味で，物理学における近似の問題は，単に数学の問題ではない．考えている問題に適合した近似法を発見するには，深い物理的洞察を必要とする．摂動論はその近似法のなかでももっともよく利用される方法であるが，例えば多数の電子を含む原子などに対する固有値問題において，電子間の相互作用を摂動項として扱ったのでは思わしい結果がえられないことが多い．そのようなときによく利用されるのが，ここで説明する**変分法**である．

(1) 変分原理と Ritz の方法

規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q)\psi(q)\mathrm{d}^3q = 1 \tag{3.1}$$

をみたしている任意の関数 $\psi(q)$ を考える．(3.1)の条件をみたす ψ の変分 $\delta\psi$ に対して，積分値

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q)H\psi(q)\mathrm{d}^3q \tag{3.2}$$

が極値をとるとき，その関数 $\psi_0(q)$ は Schrödinger の固有値方程式

$$H\psi_0(q) = \lambda_0\psi_0(q) \tag{3.3}$$

をみたす．ここで(3.3)の右辺の定数 λ_0 は

$$\lambda_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0{}^*(q)H\psi_0(q)\mathrm{d}^3q \tag{3.4}$$

で与えられる．これを**変分原理**という．

この定理は次のようにして証明される．(3.1)の束縛条件を除くために，実

数の Lagrange の未定係数 λ を用いて

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* H\psi \mathrm{d}^3q - \lambda\left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\psi \mathrm{d}^3q - 1\right] \tag{3.5}$$

とおく．この積分値 I が極値をとるとき，独立な 3 個の任意の変分 $\delta\psi$, $\delta\psi^*$ および $\delta\lambda$ に対して，$\delta I=0$ でなければならない．すなわち

$$\begin{aligned}\delta I = 0 = &\int_{-\infty}^{\infty} \delta\psi^*[H-\lambda]\psi \mathrm{d}^3q + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*[H-\lambda]\delta\psi \mathrm{d}^3q \\ &-\delta\lambda\left[\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\psi \mathrm{d}^3q - 1\right]\end{aligned} \tag{3.6}$$

である．(3.6)の右辺の第 2 項は，ハミルトニアン H のエルミート性と，係数 λ が実数であることから

$$\int_{-\infty}^{\infty} [(H-\lambda)\psi]^* \delta\psi \mathrm{d}^3q$$

と書き直される．変分 $\delta\psi$, $\delta\psi^*$ および $\delta\lambda$ は独立であるから，(3.6)が成立するためには

$$(H-\lambda)\psi = 0, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*\psi \mathrm{d}^3q = 1 \tag{3.7}$$

が要求される．そこで(3.7)の解を ψ_0, λ_0 と書くと

$$(H-\lambda_0)\psi_0 = 0, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*\psi_0 \mathrm{d}^3q = 1$$

であるから

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* H\psi_0 \mathrm{d}^3q = \lambda_0 \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*\psi_0 \mathrm{d}^3q = \lambda_0$$

となる．これが(3.4)である．

上の変分原理によると，(3.7)の Schrödinger の方程式の解を求めるには，あらゆる関数 $\psi(q)$ の集合のなかから，(3.6)の条件をみたすものを選び出せばよい．それには，(3.7)の Schrödinger の方程式を解けばよいということで，これでは話は悪循環となってしまう．そこで，規格化条件(3.1)をみたし，そして何個かのパラメーター α を含む適当な形をもつ試行関数 $\psi(q,\alpha)$ を選んできて，その関数を用いて積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q,\alpha) H \psi(q,\alpha) \mathrm{d}^3 q \tag{3.8}$$

を計算し，その積分値を極値にするように，パラメーター α の値を決定するという方法をとる．この方法を**Ritzの方法**という．この近似法の性質を調べよう．いま，試行関数 $\psi(q,\alpha)$ を H の正確な固有関数 $\psi_i(q)$ を用いて，次のように展開したとする．

$$\psi(q,\alpha) = \sum_i C_i(\alpha)\psi_i(q). \tag{3.9}$$

ここで，$H\psi_i(q)=E_i\psi_i(q)$ である．このとき，(3.8)の期待値は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q,\alpha) H \psi(q,\alpha) \mathrm{d}^3 q = \sum_i E_i C_i^*(\alpha) C_i(\alpha)$$

となる．そこで右辺の和のなかの固有値 E_i をすべて最低のエネルギー固有値 E_0 でおきかえると，$\sum_i |C_i(\alpha)|^2=1$ であるから

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(q,\alpha) H \psi(q,\alpha) \mathrm{d}^3 q \geqq E_0 \tag{3.10}$$

である．すなわち，Ritzの方法で求めた(3.8)の積分の極値は，系の最低エネルギーの上限を与えることになる．(3.10)の左辺が正確に E_0 に一致するのは，$H\psi_0=E_0\psi_0$ をみたす ψ_0 を試行関数として用いたときである．したがって，試行関数 $\psi(q,\alpha)$ としては，物理的考察にもとづいてもっとも適当と思われる関数を選ぶ必要がある．また，上の議論から分かるように，この方法は系の最低エネルギーを近似的に決定するのに有効な方法である．

(2)　ヘリウム原子の基底状態

Ritzの方法を用いて，ヘリウム原子の基底状態のエネルギーの値をもういちど計算してみよう．前節の摂動計算では，第0近似の固有関数として水素型原子の基底状態の固有関数を用いた．しかし，電子が2個存在するために，一方の電子の原子核からのCoulomb引力は，他方の電子によって部分的にシールドされていると考えられる．そこで，原子核のもっている電荷が実質的に $-(Z-\alpha)e$ $(-e>0)$ に減少すると考えて，試行関数として

$$\phi^{(0)}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2;\alpha) = \psi_{1,0,0}(r_1,\alpha)\cdot\psi_{1,0,0}(r_2,\alpha)\,;\quad \psi_{1,0,0} = \sqrt{\frac{(Z-\alpha)^3}{\pi a_0{}^3}}\mathrm{e}^{-(Z-\alpha)r/a_0} \tag{3.11}$$

と選んでみる．ここで α は変分パラメーターである．(3.11)の試行関数を用いて，(3.8)の積分

$$E_G(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^{(0)*}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; \alpha) H \phi^{(0)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2; \alpha) \mathrm{d}^3 q_1 \mathrm{d}^3 q_2 \qquad (3.12)$$

を実行する．このとき，(2.1)のハミルトニアンを次のように書きかえておく．

$$H = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_1 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{(Z-\alpha)}{r_1}\right) + \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{(Z-\alpha)}{r_2}\right)$$
$$-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left[\frac{\alpha}{r_1}+\frac{\alpha}{r_2}\right] + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{r_{12}}. \qquad (3.13)$$

(3.11)を(3.12)に代入すると，(3.13)の右辺の第1項と第2項を含む積分値は，原子核の電荷が $-e(Z-\alpha)$ $(-e>0)$ の水素型原子の基底エネルギーを与える．また第3項に対する積分は容易にでき，残る第4項に関する積分は，(2.21)の積分と同じ形である．したがって，(3.12)の積分値は

$$E_G(\alpha) = 2\left[-\frac{(Z-\alpha)^2}{8\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{a_0}\right] - 2\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}\alpha(Z-\alpha) + \frac{5}{8}\cdot\frac{(Z-\alpha)e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0}$$
$$= -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0}\left[2(Z-\alpha)^2 + 4\alpha(Z-\alpha) - \frac{5}{4}(Z-\alpha)\right] \qquad (3.14)$$

となる．ここで，基底エネルギー $E_G(\alpha)$ の値を極値にする α の値を決定するために，$\mathrm{d}E_G(\alpha)/\mathrm{d}\alpha=0$ とすると，$\alpha=5/16$ となる．このとき(3.14)の値は

$$E_G(5/16) = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0}\cdot 2\left(Z-\frac{5}{16}\right)^2 \qquad (3.15)$$

で与えられる．ここで $Z=2$ とおくと，

$$E_G(5/16) = -13.6\times 2\times(27/16)^2 = -77.45\,\mathrm{eV} \qquad (3.16)$$

をえる．この値は実測値 -78.90 eV に極めて近い値であり，摂動計算の結果 -74.8 eV よりもずっとよい．また，(3.16)の結果は(3.10)の条件をみたしている．なお，試行関数のパラメーターの数を増すなどの改良を試行関数にほどこすことにより，現在ではほとんど完全に実測値との一致がえられている．

問 47 (3.13)のハミルトニアンで $\alpha=5/16$ とおき，(3.13)の第3項と第4項を摂動項としたとき，エネルギー固有値の第1近似の補正項は0となることを示せ．

問 48 陽子-中性子からなる重陽子核の基底状態のエネルギー E_G を，核子間の相互

作用ポテンシャルが $-V_0 e^{-r/a}$ ($V_0>0$) であると仮定し，また $\psi(r)\propto \exp[-\kappa r/2a]$ を試行関数にとって，Ritz の方法により求めよ．また，陽子-中性子の換算質量を $\mu=0.837\times10^{-27}$ kg，$a=2.18\times10^{-15}$ m，$E_G=-2.23$ MeV としたとき，κ と V_0 の値を決定せよ．

§4　Hartree 近似

変分法の応用として，多電子原子を扱うのに有効な Hartree 近似の理論をとりあげよう．N 個の電子をふくむ原子のハミルトニアンは

$$H = \sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_i-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_i}\right)+\sum_{i>j}^{N}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{ij}} \tag{4.1}$$

で与えられる．ここで，この系の固有関数が，かならずしも直交しているとは限らない N 個の規格化された状態関数 $\varphi_1(\boldsymbol{r})$, $\varphi_2(\boldsymbol{r})$, …, $\varphi_N(\boldsymbol{r})$ の積のかたち

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_N) = \varphi_1(\boldsymbol{r}_1)\varphi_2(\boldsymbol{r}_2)\cdots\varphi_N(\boldsymbol{r}_N) \tag{4.2}$$

で与えられると仮定する．(4.2)を用いて(4.1)の期待値を求めると，規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_i^*(\boldsymbol{r})\varphi_i(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r = 1, \qquad i = 1,2,\cdots,N \tag{4.3}$$

により，

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}&\psi^* H\psi\,\mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\cdots\mathrm{d}^3r_N\\ &= \sum_{i=1}^{N}\int\varphi_i^*(\boldsymbol{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]\varphi_i(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r\\ &\quad+\sum_{i>j}^{N}\int|\varphi_i(\boldsymbol{r})|^2\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}|\varphi_j(\boldsymbol{r}')|^2\mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'\end{aligned} \tag{4.4}$$

となる．(4.2)の未定の状態関数 $\varphi_i(\boldsymbol{r})$ を決める方程式は変分原理を利用することによって求まる．(4.3)の N 個の束縛条件を考慮して，N 個の Lagrange の未定係数 $\mathcal{E}_i$ ($i=1,2,\cdots,N$) を導入すると，変分原理は，積分値

$$I = \int_{-\infty}^{\infty}\psi^* H\psi\,\mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2\cdots\mathrm{d}^3r_N-\sum_i\mathcal{E}_i\left\{\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_i^*(\boldsymbol{r})\varphi_i(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r-1\right\} \tag{4.5}$$

が極値をとることを要求する．そこで(4.5)に(4.4)を代入して，まず φ_i^* の変分 $\delta\varphi_i^*$ をとると

$$\delta I = \sum_{i=1}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}\delta\varphi_i^*(\boldsymbol{r})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right]\varphi_i(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r$$
$$+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N}\int_{-\infty}^{\infty}\delta\varphi_i^*(\boldsymbol{r})\varphi_i(\boldsymbol{r})\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\varphi_j^*(\boldsymbol{r}')\varphi_j(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'$$
$$-\sum_{i=1}^{N}\mathcal{E}_i\int\delta\varphi_i^*(\boldsymbol{r})\varphi_i(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r = 0$$

をえる．このとき右辺の第2項には $\delta\varphi_i^*$ と $\delta\varphi_j^*$ に比例する2項が現われ，あとの項で $i\longleftrightarrow j$ と $\boldsymbol{r}\longleftrightarrow\boldsymbol{r}'$ のいれかえをしてまとめると，$i=j$ の項を除いて，$i\gtrless j$ の項が寄与することに注意しよう．変分関数 $\delta\varphi_i^*$ は任意であるから，上の条件より $\varphi_i(\boldsymbol{r})$ のみたす方程式として

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\varphi_i(\boldsymbol{r})-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\varphi_i(\boldsymbol{r})+\sum_{j\neq i}^{N}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{|\varphi_j(\boldsymbol{r}')|^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3r'\varphi_i(\boldsymbol{r}) = \mathcal{E}_i\varphi_i(\boldsymbol{r}) \tag{4.6}$$

がえられる．変分 $\delta\varphi_i$ をとったときも，(4.6)と同じ方程式がえられ，また変分 $\delta\mathcal{E}_i$ により，(4.3)の規格化条件をえる．(4.6)の φ_i に関する非線形連立微分方程式を **Hartree の方程式**という．多電子系の Schrödinger の固有値方程式を1粒子の状態関数 $\varphi_i(\boldsymbol{r})$ に関する非線形の方程式に帰着させる上の近似法を **Hartree 近似**という．

(4.6)を(4.4)に代入すると，全系のエネルギーは

$$E = \sum_{i=1}^{N}\mathcal{E}_i-\sum_{i=1}^{N}\left(\sum_{j\neq i}-\sum_{j<i}\right)\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_i(\boldsymbol{r})|^2\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}|\varphi_j(\boldsymbol{r}')|^2\mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r'$$
$$= \sum_{i=1}^{N}\mathcal{E}_i-\sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_i(\boldsymbol{r})|^2\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}|\varphi_j(\boldsymbol{r}')|^2\mathrm{d}^3r\mathrm{d}^3r' \tag{4.7}$$

で与えられる．(4.7)の右辺の第2項が現われる理由は，第1項の和のなかで，電子間の Coulomb 斥力のエネルギーが2重に数えられているため，その部分を差し引いておく必要があることによるものである．

(4.6)の Hartree の方程式は，物理的には次のように解釈することができる．すなわち，いま i 番目の電子に注目すると，その電子に作用する力のポテンシャルは

$$V_i(\boldsymbol{r}) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+\sum_{j\neq i}^{N}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{|\varphi_j(\boldsymbol{r}')|^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3r' \tag{4.8}$$

で与えられる．右辺の第2項は，i 番目の電子以外のすべての電子の電荷分布 $e|\varphi_j(\boldsymbol{r})|^2$ のつくる Coulomb の斥力ポテンシャルである．(4.8)のポテンシャルの作用のもとでの i 番目の電子の Schrödinger の固有値方程式は

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+V_i(\boldsymbol{r})\right]\varphi_i(\boldsymbol{r}) = \mathcal{E}_i\varphi_i(\boldsymbol{r}) \tag{4.9}$$

である．(4.8)を(4.9)に代入したものが，Hartree の方程式(4.6)にほかならない．

多電子系の状態関数 $\psi(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N)$ は，正確には各電子の位置座標とスピン変数に関して反対称化して，Pauli の排他律をみたさせなければならない．(4.2)の仮定はこの条件をみたしていない．そこで(4.2)に Pauli の排他律を反映させるために，(4.2)の N 個の試行関数 $\varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_N$ のうち，同じ関数は，スピンの上下の状態に対応して，ただ2個だけであるとする．すなわち例えば，$\varphi_1=\varphi_2$ ならば，他の $(N-2)$ 個の φ_i は全部これとは異なる関数であるとし，この規則をもって Pauli の排他律の代用とするのである．

Hartree の方程式(4.6)を二つに分割した(4.8)と(4.9)の方程式系を解くには，次のような逐次近似法を用いる．まず最初に(4.9)の V_i として適当なポテンシャル関数 $V_i^{(0)}$ を仮定して，(4.9)の方程式を数値計算によって解き，状態関数 φ_i を求める．その φ_i を(4.8)の右辺の第2項に代入して求めたポテンシャル関数 $V_i^{(1)}$ を最初に仮定した $V_i^{(0)}$ と比較する．これらが一致すればよいが，そうでないときには，この $V_i^{(1)}$ を改めて(4.9)の V_i として用いる．このようにして，仮定した V_i とえられた V_i が一致するまで，上の手続きを繰り返す．この手法を**自己無矛盾場の方法**という．なお，$V_i^{(1)}$ が球対称でないときには，その方向について平均化して，球対称ポテンシャルにする．

ここで Hartree 近似の物理的意味を定性的に調べてみよう．いま，(4.8)のポテンシャルを

$$V_i(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{Z_{\mathrm{eff}}(r)}{r} \tag{4.10}$$

と表わしたとする．$Z_{\mathrm{eff}}(r)$ はまわりの他の電子の存在によって，原子核による Coulomb の引力ポテンシャルがシールドされることを示すものである．このとき，$Z_{\mathrm{eff}}(r)$ は原子核の近くでは Z 自身に等しく，原子核から遠ざかるにつ

れて漸減して，中性原子の場合には $r\to\infty$ で $Z=1$ に近づくと考えられる．$Z_{\text{eff}}(r)$ を一定値 Z にしたときには，主量子数 n が同じ $l=0$ の s 状態と $l=1$ の p 状態とは，水素原子のときと同様に縮退している．ところが，ポテンシャルが(4.10)で表わされるときには，この縮退は解けて，s 状態と p 状態のエネルギー準位は分離する．なぜなら，状態関数が原子核の近くに分布する s 状態と，それが s 状態よりも外側に分布する p 状態とでは，(4.10)の引力の大きさが異なり，s 状態のときのほうが引力が大きい．したがって s 状態のエネルギーは，p 状態のエネルギーよりも低くなるからである．

Hartree 近似では，Pauli の排他律が正確には扱われていない．そこで Fock らは，(4.2)の φ_i として直交するものをとり，(4.2)を(1.32)で与えられる Slater の行列式におきかえて，(4.6)に代わるより正確な方程式を導いた．それは

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}+\sum_{j\neq i}^{N}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{|\varphi_j(\boldsymbol{r}')|^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3r'\right]\varphi_i(\boldsymbol{r})$$
$$-\sum_{j\neq i}^{N}\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\varphi_j^*(\boldsymbol{r}')\varphi_i(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\mathrm{d}^3r'\varphi_j(\boldsymbol{r})=\mathcal{E}_i\varphi_i(\boldsymbol{r}) \tag{4.11}$$

で表わされる．これを **Hartree-Fock の方程式**という．ここで左辺の第 2 項は，量子力学特有の交換積分の項である．

問 49　ハミルトニアンが(4.1)で与えられる 2 電子系において，反対称化された試行関数

$$\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2}}\{\varphi_a(\boldsymbol{r}_1)\varphi_b(\boldsymbol{r}_2)-\varphi_a(\boldsymbol{r}_2)\varphi_b(\boldsymbol{r}_1)\}$$

を用いて，変分法により φ_a と φ_b のみたす方程式を求め，その結果を(4.11)の Hartree-Fock の方程式と比較せよ．なおこのとき，φ_a と φ_b とは直交するように選んであるものとする．

§5 周 期 律

表 6.2 は，元素の周期表のはじめから 32 番目までの元素を構成する原子の基底状態における電子の配位を示したものである．これを前節の Hartree 近似の考え方にもとづいて定性的に説明しよう．

表 6.2 の 3 列目の**イオン化エネルギー** W_{I} は，それぞれの原子内のいちばん

表6.2　周期律と電子の配位

原子番号 Z	元素	イオン化エネルギー W_I eV	電子の配位									
			1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f
1	H	13.6	1									
2	He	24.6	2									
3	Li	5.4		1								
4	Be	9.3		2								
5	B	8.3		2	1							
6	C	11.3	(2)	2	2							
7	N	14.5		2	3							
8	O	13.6		2	4							
9	F	17.4		2	5							
10	Ne	21.6		2	6							
11	Na	5.1				1						
12	Mg	7.6				2						
13	Al	6.0				2	1					
14	Si	8.1	(2)	(8)		2	2					
15	P	10.5				2	3					
16	S	10.4				2	4					
17	Cl	13.0				2	5					
18	Ar	15.8				2	6					
19	K	4.3							1			
20	Ca	6.1							2			
21	Sc	6.5						1	2			
22	Ti	6.8						2	2			
23	V	6.7						3	2			
24	Cr	6.8	(2)	(8)		(8)		5	1			
25	Mn	7.4						5	2			
26	Fe	7.9						6	2			
27	Co	7.9						7	2			
28	Ni	7.6						8	2			
29	Cu	7.7						10	1			
30	Zn	9.4						10	2			
31	Ga	6.0	(2)	(8)		(18)			2	1		
32	Ge	7.9							2	2		

エネルギーの高い電子を，その原子から引き離すのに要するエネルギーの値である．H の基底状態のエネルギー固有値は -13.6 eV であるから，$W_{\mathrm{I}}=13.6$ eV である．次の He の場合には，1s 状態にスピンが反平行の 2 個の電子が配位されている．§3 の(2)の変分法による計算では，ヘリウム原子の基底状態のエネルギーの値は -77.45 eV であった．それから電子を 1 個除いた He^{+} イオンのエネルギーは $Z^2\times(-13.6)=-4\times 13.6=-54.4$ eV である．したがって，He 原子のイオン化エネルギーは $W_{\mathrm{I}}=(-54.4)-(-77.5)=23.1$ eV となる．しかし，実測値は表 6.2 にあるように $W_{\mathrm{I}}=24.6$ eV である．この差はより精密な変分計算によって解消する．3 番目の Li では，2 個の電子がまず 1s 状態に配位され，残りの 1 個が次の 2s 状態にはいる．それは，前節で述べたように，他の電子のシールドの効果により 2p 状態は 2s 状態よりもエネルギーが高くなるからである．この 2s 状態の電子のイオン化エネルギーは 5.4 eV と小さく，そのために Li は 1 価の原子として化学的に活性である．2p 状態にはいれる電子数は $2(2\times 1+1)=6$ 個であるから，10 番目の Ne にいたるまで順次に 2p 状態に電子がつめられる．このとき，Z の増大とともに電子はより強く原子核の近くに引きつけられ，それに伴ってエネルギーが低くなる．そのため，Z の増大とともに W_{I} の値は増大し，10 番目の Ne のエネルギーは，He に次ぐ 21.6 eV という大きい値となり，そのため Ne は He に次いで化学的に安定な元素となる．

Na の場合，その 11 個の電子のうちの 10 個は，順次 1s, 2s, 2p とつめられて，最後の 1 個は 3s 状態にはいる．この 3s 状態のエネルギーは高くて，そのためイオン化エネルギーの値は，すぐ前の Ne に比べて急に小さくなり，$W_{\mathrm{I}}=5.1$ eV である．したがって，Na は Li と同じ 1 価の元素で，化学的に活性である．こうして，18 番目の Ar にいたるまで，電子は順次に 3p 状態につめこまれる．Ar のイオン化エネルギーは $W_{\mathrm{I}}=15.8$ eV で，したがって Ar は He, Ne とともに化学的に安定な希ガスである．

さて，表 6.2 を注意してみると，O の $W_{\mathrm{I}}=13.6$ eV はその前の N の $W_{\mathrm{I}}=14.5$ eV よりも小さく，また 16 番目の S の $W_{\mathrm{I}}=10.4$ eV も 15 番目の P の $W_{\mathrm{I}}=10.5$ eV よりも少し小さくなっている．$Z=5$ の B の最後の電子は 2p 状態にはいる．次の C の場合には，2p 状態に 2 個の電子が配位されるが，このとき

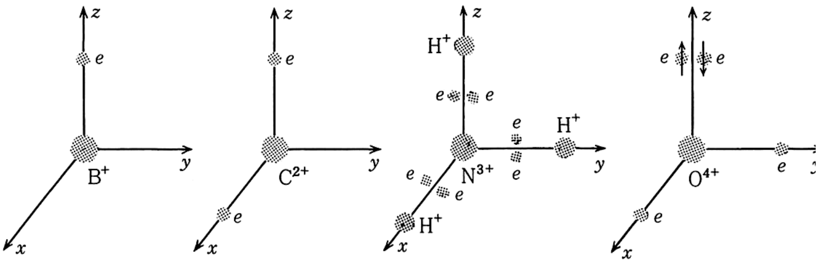


図 6.3　原子内の電子の配位

図 6.3(b)に示すように，z 軸方向にスピンを反平行にして 2 個の電子をつめるよりも，1 個の電子を z 方向にいれたとき，残りの 1 個を x 方向または y 方向にいれたほうがエネルギーが低くなる．なぜなら，電子間には斥力がはたらくからである．x 方向または y 方向の p 状態が，第 3 章，問 25 に与えた $\mathscr{X}_{1,0}$ と $\mathscr{Y}_{1,0}$ の固有状態である．次の N の 3 個の 2p 状態の電子は，図 6.3(c)に示すように，それぞれ x 軸，y 軸，z 軸の方向に分布する．そして，これらの 3 個の電子が 3 個の H と結合してアンモニア分子 NH_3 をつくるとき，H 原子は N の原子核を中心としてたがいに直角の方向に配位される．しかしこのとき，H^+ イオン間の斥力により，その間の角度は直角よりも少し大きくなる．O の場合には，2p 状態にある 4 個の電子のうちの 3 個は N と同じ配位をとるが，残りの 1 個の電子が 2p 状態にはいるには，前の 3 個とはスピンの方向を反対向きにして，すでに占められている 2p 状態のどれかにはいらざるをえない．このとき，同じ方向に配位された 2 個の電子間に強い斥力が作用し，そのためにエネルギーの値が高くなる．こうして，O のイオン化エネルギーは，N のイオン化エネルギーよりも少し小さくなるのである．同様のことが，16 番目の S にもおきる．なお，水分子 H_2O ができるとき，O に結合する 2 個の H はそれぞれの電子を O と共有しようとして，図 6.3(d)のように，まだ 1 個しか電子が配位されていない x および y 方向に配位される．こうして，2 個の水素原子は O をはさんでたがいに直角に分布しようとする．しかしこのときにも，H^+ イオン間の斥力のために，実際にはその間の角度は 90° よりもやや大きい 105° となる．

$Z=19$ の K の最後の電子は，次の 3d ($l=2$) 状態にははいらずに 4s 状態にはいる．それは，4s 状態に作用する原子核からの引力が，核から離れて分布する 3d 状態にはたらく引力よりも大きく，そのために 4s 状態のエネルギーのほうが 3d 状態のエネルギーよりも少し低くなるからである．この 4s 状態が Ca で満席になると，21 番目の Sc からあとは 3d 状態につめられる．しかし，4s 状態と 3d 状態のエネルギー差は極めて小さいため，Cr や Cu の場合，そのエネルギーの順序が微妙に狂ってくる．Mn, Fe, Co, Ni の一番外側の 4s 状態の電子の配位は同じなので，これらの元素の化学的性質はよく似ている．希土類元素のときにも，同じことがかなりはっきりした形でおきるため，それらの元素の化学的性質は非常によく似ている．このようにして，Mendeleev の元素の周期律が，量子力学にもとづいて説明される．

§6 第2量子化

§1 で同種粒子からなる体系の理論を説明したとき，原理的に区別できない粒子に番号をつけてそれらを区別した．しかし例えば，(1.22) の 3 粒子系の対称化された状態関数は，3 個の粒子のどれがどの状態にあるかに関係なく，それらの状態にある粒子数 $n_1, n_2, \cdots, n_\infty$ を指定すれば決まってしまう．このことは，それぞれの状態にある粒子数を変数として利用すれば，粒子を区別する番号付けを必要としない理論の定式化が可能であることを示唆している．その方法が，ここで述べる**第2量子化**の方法である．なお，この第2量子化という言葉は，実は誤解を招きやすい不適切な名称であるが，現在でも広く用いられているので，本書でもこの名称を用いた．この言葉のもつ意味については後に詳しく説明する．

質量 m の N 個の同種粒子が，共通のポテンシャル U の作用のもとにあり，それらの粒子間にはポテンシャル V で表わされる相互作用がはたらいているものとする．各粒子の位置座標とスピン変数をまとめて q_i と書くと，この体系のハミルトニアンは

$$H = \sum_{i=1}^{N} K(q_i) + \frac{1}{2}\sum_{i \neq j} V_{i,j} \tag{6.1}$$

で与えられる．ここで

$$K(q_i) = -(\hbar^2/2m)\triangle_i + U(q_i),$$
$$V_{i,j} = V(q_i - q_j) = V(q_j - q_i) \tag{6.2}$$

である．なお，(6.1)の右辺の第2項の1/2の因子は，2粒子間の相互作用を2重に数えないために現われたものである．この系を記述するSchrödingerの方程式は

$$i\hbar\frac{\partial\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)}{\partial t} = H\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t) \tag{6.3}$$

である．ここで，量子数 m_i で指定される任意の完全直交系 $\{\phi_{m_i}(q_i)\}$ をとり，この完全直交系を用いて，(6.3)の状態関数 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$ を次のように展開する．

$$\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t) = \sum_{m_1, m_2, \cdots, m_N} C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)\phi_{m_1}(q_1)\phi_{m_2}(q_2)\cdots\phi_{m_N}(q_N). \tag{6.4}$$

このとき，量子数 m_i のとる値は，すべての粒子に共通で，その低い値から並べたとき

$$m_i = (k_1, k_2, k_3, \cdots, k_\infty) \tag{6.5}$$

であるとする．なお，量子数 $m_1, m_2, \cdots, m_N$ のうちのいくつかが同じ値 k をとるとき，(6.4)の右辺の展開において，その項を重複してとってはならない．例えば $m_1 = m_2 = k$ のとき，(6.4)の右辺の和のなかで $C(k, k, m_3, \cdots, m_N; t)$ を含む項は1個だけであるとする．(6.3)の方程式を(6.4)の右辺の展開係数 $C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)$ に関する方程式に変換するために，(6.4)を(6.3)に代入し，左から N 個の状態関数の積 $\prod_i \phi_{m_i}{}^*(q_i)$ を掛けて積分し，$\{\phi_{m_i}(q_i)\}$ の直交規格化性を利用すると

$$\begin{aligned} i\hbar&\frac{\mathrm{d}C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)}{\mathrm{d}t} \\ &= \sum_{i=1}^{N}\sum_{m_i'}\langle m_i|\hat{K}|m_i'\rangle C(m_1, m_2, \cdots, m_i', \cdots, m_N; t) \\ &\quad + \frac{1}{2}\sum_{j\neq i}^{N}\sum_{m_i', m_j'}\langle m_i, m_j|\hat{V}|m_i', m_j'\rangle C(m_1, m_2, \cdots, m_i', \cdots, m_j', \cdots, m_N; t) \end{aligned} \tag{6.6}$$

をえる．ここで

$$\langle m_i|\hat{K}|m_i'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\phi_{m_i}{}^*(q_i)K(q_i)\phi_{m_i'}(q_i)\mathrm{d}^3q_i,$$
$$\langle m_i, m_j|\hat{V}|m_i', m_j'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\phi_{m_i}{}^*(q_i)\phi_{m_j}{}^*(q_j)V(q_i-q_j)\phi_{m_j'}(q_j)\phi_{m_i'}(q_i)\mathrm{d}^3q_i\mathrm{d}^3q_j. \tag{6.7}$$

§1で詳しく述べたように，N 個の同種粒子系を記述する(6.4)の状態関数 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$ は，一般に任意の2個の粒子のいれかえに対して対称または反対称な関数でなければならない．すなわち

$$\psi(q_1, q_2, \cdots, q_i, \cdots, q_j, \cdots, q_N; t) = \pm\psi(q_1, q_2, \cdots, q_j, \cdots, q_i, \cdots, q_N; t) \tag{6.8}$$

である．(6.8)で，右辺の符号が正のときはBose粒子系であり，負のときがFermi粒子系である．(6.8)の条件は，(6.4)の展開係数 $C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)$ にどのような条件を課すことになるだろうか．完全系 $\{\phi_{m_i}(q_i)\}$ の直交規格化性を利用して，(6.4)を逆に解き，(6.8)を用いると

$$\begin{aligned}
&C(m_1, m_2, \cdots, m_i, \cdots, m_j, \cdots, m_N; t)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\phi_{m_1}{}^*(q_1)\cdots\phi_{m_i}{}^*(q_i)\cdots\phi_{m_j}{}^*(q_j)\cdots\phi_{m_N}{}^*(q_N)\\
&\quad\times\psi(q_1, q_2, \cdots, q_i, \cdots, q_j, \cdots, q_N; t)\mathrm{d}^3q_1\cdots\mathrm{d}^3q_i\cdots\mathrm{d}^3q_j\cdots\mathrm{d}^3q_N\\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\phi_{m_1}{}^*(q_1)\cdots\phi_{m_i}{}^*(q_j)\cdots\phi_{m_j}{}^*(q_i)\cdots\phi_{m_N}{}^*(q_N)\\
&\quad\times\psi(q_1, q_2, \cdots, q_j, \cdots, q_i, \cdots, q_N; t)\mathrm{d}^3q_1\cdots\mathrm{d}^3q_j\cdots\mathrm{d}^3q_i\cdots\mathrm{d}^3q_N\\
&= \pm\int_{-\infty}^{\infty}\phi_{m_1}{}^*(q_1)\cdots\phi_{m_j}{}^*(q_i)\cdots\phi_{m_i}{}^*(q_j)\cdots\phi_{m_N}{}^*(q_N)\\
&\quad\times\psi(q_1, q_2, \cdots, q_i, \cdots, q_j, \cdots, q_N; t)\mathrm{d}^3q_1\cdots\mathrm{d}^3q_i\cdots\mathrm{d}^3q_j\cdots\mathrm{d}^3q_N\\
&= \pm C(m_1, m_2, \cdots, m_j, \cdots, m_i, \cdots, m_N; t)
\end{aligned} \tag{6.9}$$

となる．ここで2番目の等号では，積分変数 q_i と q_j をいれかえ，また3番目の等号では(6.8)の条件を利用し，$\phi_{m_i}{}^*(q_j)$ と $\phi_{m_j}{}^*(q_i)$ のおき場所をいれかえている．(6.9)から分かるように，(6.4)の展開係数 $C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)$ は，任意の2個の量子数 m_i と m_j のいれかえに対して，対称または反対称でなければならない．そこではじめに述べたように，各粒子のもつ N 個の量子数 $(m_1, m_2, \cdots, m_N)$ のかわりに，それぞれの量子数のとる(一般には無限個の)値 $k_1, k_2, \cdots, k_\infty$ に注目し，それらの値をとる粒子の数 $n_1, n_2, \cdots, n_\infty$ を用いて体系を記述することを考えよう．それは，表6.1の (q_1, q_2, q_3) や (m, n, r) を変

数に選ぶかわりに，右側の縦に並ぶ粒子数を変数にとることである．この変数の書きかえをするとき，系がBose粒子系のときとFermi粒子系のときとでは別の扱いをする必要がある．そこで次にまずBose粒子系の場合からはじめよう．

（1） Bose粒子系

この場合，体系の状態を記述する展開係数 $C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)$ は，任意の2個の量子数 m_i と m_j のいれかえに対して対称である．そこではじめに，$(m_1, m_2, \cdots, m_N)$ の N 個の量子数のとる値が全部異なるときを考える．ここで話を分かりやすくするために，3粒子系について調べてみよう．例えば，3個の量子数 (m_1, m_2, m_3) の組のとる値が (k_4, k_5, k_6) の項を(6.4)の展開式から取り出すと

$$\begin{aligned}
&C(k_4, k_5, k_6)\phi_4(q_1)\phi_5(q_2)\phi_6(q_3) + C(k_4, k_6, k_5)\phi_4(q_1)\phi_6(q_2)\phi_5(q_3) \\
&\quad + C(k_5, k_4, k_6)\phi_5(q_1)\phi_4(q_2)\phi_6(q_3) + C(k_5, k_6, k_4)\phi_5(q_1)\phi_6(q_2)\phi_4(q_3) \\
&\quad + C(k_6, k_4, k_5)\phi_6(q_1)\phi_4(q_2)\phi_5(q_3) + C(k_6, k_5, k_4)\phi_6(q_1)\phi_5(q_2)\phi_4(q_3)
\end{aligned} \tag{6.10}$$

である．ここで $\phi_{k_i}(q) = \phi_i(q)$ と略記している．(6.10)の3!個の項の係数 C は，(6.9)の条件により全部同じものである．そこで，k_i の大きさの順に並ぶ変数をもつ係数 $C(k_4, k_5, k_6)$ を残して，これを(6.10)からくくり出す．このとき，どの係数をくくり出すかは，Bose粒子系の場合には任意であるが，Fermi粒子系のときにはこれが問題になる．このようにすると(6.10)は，(1.25)を用いることにより

$$\begin{aligned}
&C(k_4, k_5, k_6)\cdot \sum_{\mathrm{p}(q_1, q_2, q_3)} \mathrm{P}(\phi_4(q_1)\phi_5(q_2)\phi_6(q_3)) \\
&\quad = C(k_4, k_5, k_6)\cdot \sqrt{3!}\,\phi_{4,5,6}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, q_3)
\end{aligned}$$

と表わされる．ここで $\mathrm{p}(q_1, q_2, q_3)$ の和は，変数 q_1, q_2, q_3 のすべての順列をとって加えることを意味する．次に，量子数 (m_1, m_2, m_3) のセットのとる値が (k_4, k_4, k_6) である場合，それに属するものを(6.4)から取り出すと，この種の項は $(3!/2!)$ 個あり

$$\begin{aligned}
&C(k_4, k_4, k_6)\phi_4(q_1)\phi_4(q_2)\phi_6(q_3) + C(k_4, k_6, k_4)\phi_4(q_1)\phi_6(q_2)\phi_4(q_3) \\
&\quad + C(k_6, k_4, k_4)\phi_6(q_1)\phi_4(q_2)\phi_4(q_3)
\end{aligned}$$

$$= C(k_4, k_4, k_6)(1/2!) \sum_{\mathrm{p}(q_1, q_2, q_3)} \mathrm{P}(\phi_4(q_1)\phi_4(q_2)\phi_6(q_3))$$

$$= C(k_4, k_4, k_6)(\sqrt{3!2!}/2!)\phi_{4,4,6}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, q_3) \qquad (6.11)$$

となる．ここで最後の等号では(1.25)を用いている．

上の3粒子系の例からも分かるように，一般に各粒子のもつN個の量子数$(m_1, m_2, \cdots, m_N)$のとる値が全部異なるときには，同じ係数Cをもつ項の数は，N個の量子数の順列の数$N!$であり，またN個の量子数のうち，量子数の値がk_1である粒子数がn_1個，k_2に属する粒子数がn_2個，…，k_∞の粒子数がn_∞個のとき，同じ係数Cをもつ項の数は$(N!/n_1!\,n_2!\cdots n_\infty!)$個である．したがって，(6.4)の展開で同じ係数$C$をもつ項の和は

$$\sum_{\text{同じ}C} C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)\phi_{m_1}(q_1)\phi_{m_2}(q_2)\cdots\phi_{m_N}(q_N)$$

$$= C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)\frac{1}{n_1!\,n_2!\cdots n_\infty!}\sum_{\mathrm{p}}\mathrm{P}(\phi_{m_1}(q_1)\phi_{m_2}(q_2)\cdots\phi_{m_N}(q_N))$$

$$= C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)\frac{\sqrt{N!\,n_1!\,n_2!\cdots n_\infty!}}{n_1!\,n_2!\cdots n_\infty!}\phi_{m_1, m_2, \cdots, m_N}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, \cdots, q_N)$$

$$= C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)\sqrt{\frac{N!}{n_1!\,n_2!\cdots n_\infty!}}\phi_{m_1, m_2, \cdots, m_N}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, \cdots, q_N)$$

$$\equiv F(n_1, n_2, \cdots, n_\infty; t)\phi_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, \cdots, q_N) \qquad (6.12)$$

と表わされる．(6.12)の1番目の等号以下の展開係数$C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)$では，$m_1 \leqq m_2 \leqq \cdots \leqq m_N$の順序にならんでいるとし，また，2番目の等号では(1.25)を用い，また，最後の等号では粒子数表示を用いて

$$\left.\begin{aligned}\phi_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, \cdots, q_N) &\equiv \phi_{m_1, m_2, \cdots, m_N}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, \cdots, q_N), \\ F(n_1, n_2, \cdots, n_\infty; t) &\equiv \sqrt{\frac{N!}{n_1!\,n_2!\cdots n_\infty!}}C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)\end{aligned}\right\} \qquad (6.13)$$

と定義している．なお，(6.13)の第2式の最後の$C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)$において，$m_1 \leqq m_2 \leqq \cdots \leqq m_N$である．(6.11)の例の場合，(6.13)は

$$\phi_{0_1, 0_2, 0_3, 2_4, 0_5, 1_6, 0_7, \cdots, 0_\infty}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, q_3) = \phi_{k_4, k_4, k_6}{}^{(\mathrm{S})}(q_1, q_2, q_3),$$

$$F(0_1, 0_2, 0_3, 2_4, 0_5, 1_6, 0_7, \cdots, 0_\infty; t) = \sqrt{\frac{3!}{2!\,1!}}C(k_4, k_4, k_6; t)$$

である．(6.12)と(6.13)を用いると，(6.4)の展開式は

$$\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t) = \sum_{\substack{n_1, n_2, \cdots, n_\infty \\ N=\sum_k n_k}} F(n_1, n_2, \cdots, n_\infty; t) \phi_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty}{}^{(S)}(q_1, q_2, \cdots, q_N) \tag{6.14}$$

となり，対称関数 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$ が対称関数 $\phi_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty}{}^{(S)}(q_1, q_2, \cdots, q_N)$ により展開される．なおこのとき，対称関数 $\phi_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty}{}^{(S)}(q_1, q_2, \cdots, q_N)$ の直交規格化性により

$$\sum_{\substack{n_1, n_2, \cdots, n_\infty \\ \sum n_k=N}} |F(n_1, n_2, \cdots, n_\infty; t)|^2 = 1 \tag{6.15}$$

である．

以上の準備のもとで，展開係数 C に関する Schrödinger 方程式(6.6)を粒子数表示に変換することを考える．(6.6)の右辺の第1項からはじめる．左辺の $C(m_1, m_2, \cdots, m_i, \cdots, m_N; t)$ と右辺の第1項の $C(m_1, m_2, \cdots, m_i', \cdots, m_N; t)$ の m_i と m_i' の値を，それぞれ k および k' とすると

$$\begin{aligned} C(m_1, m_2, \cdots, m_i, \cdots, m_N; t) &= C(m_1, m_2, \cdots, k, \cdots, m_N; t), \\ C(m_1, m_2, \cdots, m_i', \cdots, m_N; t) &= C(m_1, m_2, \cdots, k', \cdots, m_N; t) \end{aligned} \tag{6.16}$$

である．これらの係数をくらべると，後者は前者からみて k の値の粒子数 n_k が1個減少し，k' の値をもつ粒子数が1個増加している．すなわちこのとき，(6.13)の第2式は，それぞれ

$$\begin{aligned} C(m_1, m_2, \cdots, k, \cdots, m_N; t) &= \sqrt{\frac{n_1! \cdots n_k! \cdots n_{k'}! \cdots n_\infty!}{N!}} \\ &\quad \times F(n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_{k'}, \cdots, n_\infty; t), \\ C(m_1, m_2, \cdots, k', \cdots, m_N; t) &= \sqrt{\frac{n_1! \cdots (n_k-1)! \cdots (n_{k'}+1)! \cdots n_\infty!}{N!}} \\ &\quad \times F(n_1, n_2, \cdots, n_k-1, \cdots, n_{k'}+1, \cdots, n_\infty; t) \end{aligned} \tag{6.17}$$

と表わされる．なお，(6.17)では $k'>k$ と仮定している．すると，(6.16)の係数 $C(m_1, m_2, \cdots, k', \cdots, m_N; t)$ は約束と違って，$m_1 \leqq \cdots \leqq k' \leqq \cdots \leqq m_N$ の順序になっているとは限らないが，Bose 粒子系のときにはこの順序を気にする必要はない．(6.17)の変数変換式を用いると，(6.6)の右辺の第1項は

$$\sum_i \sum_{m_i'} \langle m_i|\hat{K}|m_i'\rangle C(m_1, m_2, \cdots, m_i', \cdots, m_N; t)$$
$$= \sum_{m_1'} \langle m_1|\hat{K}|m_1'\rangle C(m_1', m_2, \cdots, m_N; t) + \sum_{m_2'} \langle m_2|\hat{K}|m_2'\rangle C(m_1, m_2', \cdots, m_N; t)$$
$$+ \cdots + \sum_{m_N'} \langle m_N|\hat{K}|m_N'\rangle C(m_1, m_2, \cdots, m_N'; t)$$
$$= \sum_{k'} \langle m_1|\hat{K}|k'\rangle C(k', m_2, \cdots, m_N; t) + \sum_{k'} \langle m_2|\hat{K}|k'\rangle C(m_1, k', \cdots, m_N; t)$$
$$+ \cdots + \sum_{k'} \langle m_N|\hat{K}|k'\rangle C(m_1, m_2, \cdots, k'; t)$$
$$= \sum_{k'} \{\langle m_1|\hat{K}|k'\rangle + \langle m_2|\hat{K}|k'\rangle + \cdots + \langle m_N|\hat{K}|k'\rangle\}$$
$$\times \sqrt{\frac{n_1!\cdots(n_k-1)!\cdots(n_{k'}+1)!\cdots n_\infty!}{N!}} F(n_1, n_2, \cdots, n_k-1, \cdots, n_{k'}+1, \cdots, n_\infty; t)$$

となる．ここで最後の等号では，その前の表式内の N 個の係数 C が全部同じ(6.17)の第2式で表わされることを利用している．$\langle m_i|\hat{K}|k'\rangle = \langle k|\hat{K}|k'\rangle$ は，N 個のすべての粒子に対して同じ値をとる．また(6.17)の第1式の係数 C で表わされる状態では，量子数の値が k の粒子数は n_k 個であるから，上の最後の表式の m_i に関する和は

$$\sum_{i=1}^{N} \langle m_i|\hat{K}|k'\rangle = \sum_k n_k \langle k|\hat{K}|k'\rangle$$

と表わされる．したがって，(6.6)の右辺の第1項を粒子数表示に移すと

$$\sum_i \sum_{m_i'} \langle m_i|\hat{K}|m_i'\rangle C(m_1, m_2, \cdots, m_i', \cdots, m_N; t)$$
$$= \sum_{k,k'} n_k \langle k|\hat{K}|k'\rangle \sqrt{\frac{n_1!\cdots(n_k-1)!\cdots(n_{k'}+1)!\cdots n_\infty!}{N!}}$$
$$\times F(n_1, n_2, \cdots, n_k-1, \cdots, n_{k'}+1, \cdots, n_\infty; t) \tag{6.18}$$

となる．ただし，$k'=k$ のときには

$$\sum_k n_k \langle k|\hat{K}|k\rangle \sqrt{\frac{n_1!\cdots n_k!\cdots n_\infty!}{N!}} F(n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty; t)$$

である．

次に，(6.6)の右辺の第2項を粒子数表示に移そう．このときも，(6.18)と同様の手法により

$$\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\sum_{m_i', m_j'}\langle m_i, m_j|\hat{V}|m_i', m_j'\rangle C(m_1, m_2, \cdots, m_i', \cdots, m_j', \cdots, m_N; t)$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\sum_{p', q'}\langle m_i, m_j|\hat{V}|p', q'\rangle C(m_1, m_2, \cdots, p', \cdots, q', \cdots, m_N; t)$$

$$=\frac{1}{2}\sum_{\substack{p, q\\ p', q'}} n_p n_q\langle p, q|\hat{V}|p', q'\rangle\sqrt{\frac{n_1!\cdots(n_p-1)!\cdots(n_q-1)!\cdots(n_{q'}+1)!\cdots(n_{p'}+1)!\cdots n_\infty!}{N!}}$$
$$\times F(n_1, n_2, \cdots, n_p-1, \cdots, n_q-1, \cdots, n_{q'}+1, \cdots, n_{p'}+1, \cdots, n_\infty; t) \qquad (6.19)$$

がえられる．このとき

$$\langle p, q|\hat{V}|p', q'\rangle=\int\phi_p{}^*(q_i)\phi_q{}^*(q_j)V(q_i-q_j)\phi_{q'}(q_j)\phi_{p'}(q_i)\mathrm{d}^3q_i\mathrm{d}^3q_j$$

は，すべての粒子対に対して同じ値をとる．ここで(6.19)の2番目の等号について注意しておく．それは，(6.19)のはじめの二つの表式には，粒子の番号に関する和に $i\neq j$ の制限があることに関する注意である．この制限を粒子数表示に書きかえると

$$\sum_{i\neq j}\langle m_i, m_j|\cdots=\sum_{i, j=\mathrm{all}}\langle m_i, m_j|\cdots-\sum_i\langle m_i, m_i|\cdots$$
$$=\sum_{p, q=\mathrm{all}} n_p n_q\langle p, q|\cdots-\sum_p n_p\langle p, p|\cdots$$
$$=\sum_{p\neq q} n_p n_q\langle p, q|\cdots+\sum_p n_p(n_p-1)\langle p, p|\cdots \qquad (6.20)$$

である．すなわち，m_i と m_j が同一の数値 $p=q$ をとるときには，その項は(6.19)の最後の表式ではなく

$$\frac{1}{2}\sum_{p, p', q'} n_p(n_p-1)\langle p, p|\hat{V}|p', q'\rangle C(m_1, m_2, \cdots, p', \cdots, q', \cdots, m_N; t)$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{p, p', q'} n_p(n_p-1)\langle p, p|\hat{V}|p', q'\rangle\sqrt{\frac{n_1!\cdots(n_p-2)!\cdots(n_{q'}+1)!\cdots(n_{p'}+1)!\cdots n_\infty!}{N!}}$$
$$\times F(n_1, n_2, \cdots, n_p-2, \cdots, n_{q'}+1, \cdots, n_{p'}+1, \cdots, n_\infty; t) \qquad (6.21)$$

となる．このとき，(6.21)の $n_p(n_p-1)$ の因子のなかの $-n_p$ の項が $i=j$ の項を除去する役割を果していることに注意しよう．そのほかに，$p=p'$ の項などについても(6.19)の最後の表式とは違う形になる．ところが，次に導入する昇降演算子を利用すると，これらの項はみな(6.19)と全く同じ表式で表わされて，

結果的には変数 p, q, p' および q' のすべての値に対して同じ表式でまとめられるのである．

(6.17)の第1式と(6.18)および(6.19)を，(6.6)の方程式に代入すると，

$$
\begin{aligned}
&i\hbar\frac{\mathrm{d}F(n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty; t)}{\mathrm{d}t} \\
&\quad =\sum_k n_k\langle k|\hat{K}|k\rangle F(n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty; t) \\
&\qquad +\sum_k \sum_{k'\neq k}\sqrt{n_k}\sqrt{n_{k'}+1}\langle k|\hat{K}|k'\rangle F(n_1, n_2, \cdots, n_k-1, \cdots, n_{k'}+1, \cdots, n_\infty; t) \\
&\qquad +\frac{1}{2}\sum_{\substack{p,q\\ p',q'}}\sqrt{n_p}\sqrt{n_q}\sqrt{n_{q'}+1}\sqrt{n_{p'}+1}\langle p, q|\hat{V}|p', q'\rangle \\
&\qquad \times F(n_1, n_2, \cdots, n_p-1, \cdots, n_q-1, \cdots, n_{q'}+1, \cdots, n_{p'}+1, \cdots, n_\infty; t)
\end{aligned}
\tag{6.22}
$$

となる．

ここで第2章§9で導入した昇降演算子 $\hat{a}^\dagger$ と $\hat{a}$ を，多自由度の場合に一般化して，交換関係

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}, \qquad [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}] = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger] = 0 \tag{6.23}$$

をみたす演算子 $\hat{a}_k$ と $\hat{a}_k^\dagger$ を導入する．エルミート演算子 $\hat{n}_k \equiv \hat{a}_k^\dagger\hat{a}_k$ の固有ベクトル $|n_k\rangle$ を

$$\hat{n}_k|n_k\rangle = n_k|n_k\rangle \tag{6.24}$$

の解として定義すると，第2章§9のときと同じように，$\hat{n}_k$ の固有値 n_k のとる値は $0, 1, 2, \cdots$ の0または正の整数である．また，$\langle n_k|n_k\rangle=1$ と規格化しておくと

$$\hat{a}_k|n_k\rangle = \sqrt{n_k}|n_k-1\rangle, \qquad \hat{a}_k^\dagger|n_k\rangle = \sqrt{n_k+1}|n_k+1\rangle \tag{6.25}$$

であり，とくに $\hat{a}_k|0_k\rangle=0$ である．(6.25)の性質から，$\hat{a}_k^\dagger$ を**生成演算子**，$\hat{a}_k$ を**消滅演算子**ともいう．

ここで，それぞれの k の値に対する固有ベクトル $|n_k\rangle$ の直積

$$|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle \equiv |n_1\rangle|n_2\rangle\cdots|n_\infty\rangle \tag{6.26}$$

をとり，これと(6.13)の係数 F を用いて，任意の N 粒子系の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ を

$$|\Psi(t)\rangle \equiv \sum_{\substack{n_1, n_2, \cdots, n_\infty\\ N=\sum n_k}} F(n_1, n_2, \cdots, n_\infty; t)|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle \tag{6.27}$$

で定義する．この状態ベクトルと(6.4)の状態関数 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$ の関係については後に説明する．

さて，状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ のみたす方程式を(6.23)で定義された生成消滅演算子 $\hat{a}_k{}^\dagger$ と $\hat{a}_k$ を用いて表わすことにしよう．まず(6.22)の右辺の第1項をとり，これに固有ベクトル $|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle$ を掛けて，変数 $n_1, n_2, \cdots, n_\infty$ に関する和をとると，(6.24)により

$$\begin{aligned}
&\sum_k \langle k|\hat{K}|k\rangle \sum_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty} F(n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty; t) n_k |n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty\rangle \\
&\quad = \sum_k \langle k|\hat{K}|k\rangle \sum_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty} F(n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty; t) \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k |n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty\rangle \\
&\quad = \sum_k \langle k|\hat{K}|k\rangle \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k |\Psi(t)\rangle \qquad (6.28)
\end{aligned}$$

となる．また(6.22)の右辺の第2項に対しては，$n_k - 1 \equiv \bar{n}_k$，$n_{k'} + 1 \equiv \bar{n}_{k'}$ と変数を変え，また(6.25)を用いると

$$\begin{aligned}
&\sum_k \sum_{k' \neq k} \langle k|\hat{K}|k'\rangle \sum_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty} F(n_1, n_2, \cdots, n_k - 1, \cdots, n_{k'} + 1, \cdots, n_\infty; t) \\
&\qquad \times \sqrt{n_k}\sqrt{n_{k'}+1}\,|n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_{k'}, \cdots, n_\infty\rangle \\
&\quad = \sum_k \sum_{k' \neq k} \sum_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty} \langle k|\hat{K}|k'\rangle F(n_1, n_2, \cdots, \bar{n}_k, \cdots, \bar{n}_{k'}, \cdots, n_\infty; t) \\
&\qquad \times \sqrt{\bar{n}_k + 1}\sqrt{\bar{n}_{k'}}\,|n_1, n_2, \cdots, \bar{n}_k + 1, \cdots, \bar{n}_{k'} - 1, \cdots, n_\infty\rangle \\
&\quad = \sum_k \sum_{k' \neq k} \langle k|\hat{K}|k'\rangle \sum_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty} F(n_1, n_2, \cdots, \bar{n}_k, \cdots, \bar{n}_{k'}, \cdots, n_\infty; t) \\
&\qquad \times \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_{k'} |n_1, n_2, \cdots, \bar{n}_k, \cdots, \bar{n}_{k'}, \cdots, n_\infty\rangle \\
&\quad = \sum_k \sum_{k' \neq k} \langle k|\hat{K}|k'\rangle \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_{k'} |\Psi(t)\rangle \qquad (6.29)
\end{aligned}$$

である．上の変数変換で $\bar{n}_k = -1$ $(n_k = 0)$ と $\bar{n}_{k'} = 0$ $(n_{k'} = -1)$ の項は，それぞれ $\sqrt{\bar{n}_k + 1}$ と $\sqrt{\bar{n}_{k'}}$ の因子があるために，自動的に和に寄与しないようになっていることに注意されたい．したがって，(6.22)の右辺の第1項と第2項からの寄与は，(6.28)と(6.29)を加えることにより，まとめて

$$\sum_{k, k'} \langle k|\hat{K}|k'\rangle \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_{k'} |\Psi(t)\rangle \qquad (6.30)$$

と簡潔に表現される．

同様にして，(6.22)の右辺の第3項についても，この項に右から固有ベクト

ル $|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle$ を掛けて，変数 $n_1, n_2, \cdots, n_\infty$ に関する和をとると次のようになる．

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{p,q\\p',q'}}\sum_{n_1,n_2,\cdots,n_\infty}\langle p,q|\hat{V}|p',q'\rangle\sqrt{n_p}\sqrt{n_q}\sqrt{n_{q'}+1}\sqrt{n_{p'}+1}$$
$$\times F(n_1,n_2,\cdots,n_p-1,\cdots,n_q-1,\cdots,n_{q'}+1,\cdots,n_{p'}+1,\cdots,n_\infty;t)|n_1,n_2,\cdots,n_\infty\rangle$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{\substack{p,q\\p',q'}}\langle p,q|\hat{V}|p',q'\rangle\sum_{n_1,n_2,\cdots,n_\infty}F(n_1,n_2,\cdots,\bar{n}_p,\cdots,\bar{n}_q,\cdots,\bar{n}_{q'},\cdots,\bar{n}_{p'},\cdots,n_\infty;t)$$
$$\times\sqrt{\bar{n}_p+1}\sqrt{\bar{n}_q+1}\sqrt{\bar{n}_{q'}}\sqrt{\bar{n}_{p'}}|n_1,n_2,\cdots,\bar{n}_p+1,\cdots,\bar{n}_q+1,\cdots,\bar{n}_{q'}-1,\cdots,\bar{n}_{p'}-1,\cdots,n_\infty\rangle$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{\substack{p,q\\p',q'}}\langle p,q|\hat{V}|p',q'\rangle\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_{q'}\hat{a}_{p'}|\Psi(t)\rangle. \tag{6.31}$$

なお，(6.21)のようなタイプの項は

$$\frac{1}{2}\sum_{p,p',q'}\sum_{n_1,n_2,\cdots,n_\infty}\sqrt{n_p}\sqrt{n_p-1}\sqrt{n_{q'}+1}\sqrt{n_{p'}+1}\langle p,p|\hat{V}|p',q'\rangle$$
$$\times F(n_1,n_2,\cdots,n_p-2,\cdots,n_{q'}+1,\cdots,n_{p'}+1,\cdots,n_\infty;t)|n_1,n_2,\cdots,n_\infty\rangle$$
$$=\frac{1}{2}\sum_{p,p',q'}\sum_{n_1,n_2,\cdots,n_\infty}\langle p,p|\hat{V}|p',q'\rangle F(n_1,n_2,\cdots,\bar{n}_p,\cdots,\bar{n}_{q'},\cdots,\bar{n}_{p'},\cdots,n_\infty;t)$$
$$\times\sqrt{\bar{n}_p+2}\sqrt{\bar{n}_p+1}\sqrt{\bar{n}_{q'}}\sqrt{\bar{n}_{p'}}|n_1,n_2,\cdots,\bar{n}_p+2,\cdots,\bar{n}_{q'}-1,\cdots,\bar{n}_{p'}-1,\cdots,n_\infty\rangle$$

において

$$\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_p{}^\dagger|\bar{n}_p\rangle=\sqrt{\bar{n}_p+1}\,\hat{a}_p{}^\dagger|\bar{n}_p+1\rangle=\sqrt{\bar{n}_p+1}\sqrt{\bar{n}_p+2}|\bar{n}_p+2\rangle$$

であることに注意すると，この項も(6.31)と同じ形

$$\frac{1}{2}\sum_{p,p',q'}\langle p,p|\hat{V}|p',q'\rangle\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_{q'}\hat{a}_{p'}|\Psi(t)\rangle \tag{6.32}$$

で表わされる．その他の項についても同様である．したがって，結果的にはこれらの項も全部一括して(6.31)で表わされる．このとき，変数 p,q,p',q' に関する和は無制限である．こうして(6.27)の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ は

$$\begin{aligned}&i\hbar\frac{\mathrm{d}|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t}=\hat{H}|\Psi(t)\rangle,\\&\hat{H}=\sum_{k,k'}\langle k|\hat{K}|k'\rangle\hat{a}_k{}^\dagger\hat{a}_{k'}+\frac{1}{2}\sum_{\substack{p,q\\p',q'}}\langle p,q|\hat{V}|p',q'\rangle\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_q{}^\dagger\hat{a}_{q'}\hat{a}_{p'}\end{aligned} \tag{6.33}$$

をみたすことが分かる．ここで，完全直交系 $\{\phi_m(\boldsymbol{x})\}$ として K の固有関数

$$K\phi_k(\boldsymbol{x}) = E_k\phi_k(\boldsymbol{x}) \tag{6.34}$$

を選べば，(6.33)のハミルトニアン $\hat{H}$ は

$$\hat{H} = \sum_k E_k \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k + \frac{1}{2}\sum_{\substack{p,q \\ p',q'}} \langle p,q|\hat{V}|p',q'\rangle \hat{a}_p{}^\dagger \hat{a}_q{}^\dagger \hat{a}_{q'} \hat{a}_{p'} \tag{6.35}$$

と表わされる．

このようにして，N 個の Bose 粒子からなる体系を粒子に番号づけをしない形式で表わすことに成功した．また，(6.33)の方程式には粒子の総数 N も，(6.3)の方程式における状態関数 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$ のようには表面には現われてはいない．このために，(6.33)を利用すると，(6.3)とは違って粒子数が変化するような現象をも扱うことができ，それに伴って(6.3)の形式では不可能な新しい近似法を考えることも可能になる．これが第2量子化の方法の最大の利点となる．

さて，(6.24)の演算子 $\hat{n}_k = \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k$ は，量子数 k に属する粒子数を表わす演算子である．したがって，$\hat{N} = \sum_k \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k$ は，系の全粒子数を表わす演算子である．事実

$$\hat{N}|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle = \sum_k n_k|n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty\rangle = N|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle$$

であり，(6.26)は全粒子数 $\hat{N}$ の固有状態である．また，(6.33)で表わされるハミルトニアンの場合，交換関係

$$[\hat{N}, \hat{H}] = 0 \tag{6.36}$$

がみたされることも容易に示される．これは，系の全粒子数が保存されることを意味している．

ここで演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ と $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ を

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \sum_k \hat{a}_k \phi_k(\boldsymbol{x}), \quad \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) = \sum_k \hat{a}_k{}^\dagger \phi_k{}^*(\boldsymbol{x}) \tag{6.37}$$

で定義する．ここで $\{\phi_k(\boldsymbol{x})\}$ は(6.4)の展開式で用いた完全直交系である．また上の変数 $\boldsymbol{x}$ は，粒子の位置を示す変数 $\boldsymbol{q}_i$ ではなく単に場所を指定するパラメーターである．スピンがあれば，それを指示する添字を(6.37)の演算子 $\hat{\psi}$

などに追加しておく必要があるが，簡単のためここでは，それは省略する．(6.23)の交換関係を利用すると，(6.37)で定義される演算子の交換関係として

$$
\begin{aligned}
[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}')] &= \sum_{k,k'} [\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}{}^{\dagger}] \phi_k(\boldsymbol{x}) \phi_{k'}{}^{*}(\boldsymbol{x}') \\
&= \sum_{k,k'} \delta_{k,k'} \phi_k(\boldsymbol{x}) \phi_k{}^{*}(\boldsymbol{x}') = \sum_k \phi_k(\boldsymbol{x}) \phi_k{}^{*}(\boldsymbol{x}') \\
&= \delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \qquad (6.38)
\end{aligned}
$$

がえられる．ここで最後の等号では，$\{\phi_k(\boldsymbol{x})\}$ の完全性の条件を用いている．同様にして

$$
[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}(\boldsymbol{x}')] = [\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}), \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}')] = 0 \qquad (6.39)
$$

である．(6.37)より

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}) K(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}^3 x &= \sum_{k,k'} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_k{}^{*}(\boldsymbol{x}) K(\boldsymbol{x}) \phi_{k'}(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}^3 x \cdot \hat{a}_k{}^{\dagger} \hat{a}_{k'} \\
&= \sum_{k,k'} \langle k | \hat{K} | k' \rangle \hat{a}_k{}^{\dagger} \hat{a}_{k'}
\end{aligned}
$$

であり，また

$$
\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}') V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \hat{\psi}(\boldsymbol{x}') \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \mathrm{d}^3 x \, \mathrm{d}^3 x' \\
&= \sum_{\substack{p,q \\ p',q'}} \langle p, q | \hat{V} | p', q' \rangle \hat{a}_p{}^{\dagger} \hat{a}_q{}^{\dagger} \hat{a}_{q'} \hat{a}_{p'}
\end{aligned}
$$

となるから，(6.33)のハミルトニアン $\hat{H}$ は

$$
\begin{aligned}
\hat{H} = &\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3 x \, \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}) K(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \\
&+ \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3 x \, \mathrm{d}^3 x' \, \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}) \hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}') V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}') \hat{\psi}(\boldsymbol{x}') \hat{\psi}(\boldsymbol{x}) \qquad (6.40)
\end{aligned}
$$

と表わすことができる．

なお，(6.26)で $n_1=0$, $n_2=0$, …, $n_\infty=0$ のとき

$$
|0\rangle \equiv |0_1, 0_2, \cdots, 0_\infty\rangle
$$

と書いて，これを**真空状態**という．この状態に $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ を作用させると明らかに

$$
\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) |0\rangle = 0 \qquad (6.41)
$$

である．

これまでの議論は，すべて Schrödinger 表示を用いた理論であった．ここで，Heisenberg 表示に移ろう．このとき，演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ と $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ は，(6.40)の $\hat{H}$ を用いて

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}, \qquad \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}, t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar} \tag{6.42}$$

と変換される．これを時間 t で微分することによって，Heisenberg の運動方程式

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} = [\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t), \hat{H}] \tag{6.43}$$

がえられる．ここで $\hat{H}$ として(6.40)の表式を利用し，Heisenberg 表示での(6.38),(6.39)の交換関係を用いて(6.43)の右辺を計算すると，Heisenberg 演算子のみたす方程式として

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + U(\boldsymbol{x})\right)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t) \\ &\quad + \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^3x'\, V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t) \end{aligned} \tag{6.44}$$

をえる(問52)．粒子間の相互作用 V がないときを考えると，(6.44)は

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + U(\boldsymbol{x})\right)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t) \tag{6.45}$$

である．この方程式は，1粒子系の Schrödinger の方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\boldsymbol{r}, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + U(\boldsymbol{r})\right)\psi(\boldsymbol{r}, t) \tag{6.46}$$

と全く同じ形であり，(6.45)は(6.46)の状態関数 $\psi(\boldsymbol{r}, t)$ を演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t)$ におきかえたことになっている．(6.46)の Schrödinger の方程式は，すでに量子化の手続きを経た方程式である．(6.45)はその方程式の状態関数をもういちど量子化して演算子とみなしたようにみえる．そこで，ここで説明した理論を**第2量子化の方法**というのである．しかしこの用語は，本当は誤解をまねくまことに不適当な言葉である．(6.45)の Heisenberg の運動方程式は，(6.46)の Schrödinger の方程式に2度目の量子化をほどこしたものではなく，たんに(6.3)の Bose 粒子系の Schrödinger の方程式を粒子数表示に書き直したものにすぎない．また，(6.46)は Schrödinger 表示で位置表示を用いた方程式で

あるのに対して，(6.45)は Heisenberg 表示で粒子数表示を用いた方程式である．さらに，粒子間に相互作用 V があるときには，(6.45)は(6.44)におきかえられ，その形は(6.46)とは全く違った形になり，上の形の類似性は失われてしまう．(6.46)の $\psi(\boldsymbol{r},t)$ は粒子の位置の確率振幅を表わすものであるから，いかなる体系であろうと，それは線形方程式をみたさねばならない．非線形方程式では，量子力学の第1原理である重ね合わせの原理が成立しないからである．これに対して，粒子間に相互作用のあるときの $\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$ のみたす方程式は(6.44)の非線形方程式である．$\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$ は演算子であって，状態関数ではないから，必ずしも線形方程式をみたすとはかぎらない．なお，粒子数表示での状態関数 $|\boldsymbol{\Psi}(t)\rangle$ は，(6.33)にあるように，あくまでも線形の Schrödinger 方程式をみたす．またこの演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$ は，空間内のすべての場所 $\boldsymbol{x}$ で定義される量子化された場とみなされるべきものである．

Schrödinger は，はじめて(6.46)の形の方程式を書いたときに，$\psi(\boldsymbol{r},t)$ は電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t)$ のような古典的な場 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ であると考えた．この古典的な場 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ を **de Broglie-Schrödinger の場**という．この考えは，Born らによる波動関数の確率解釈によって，いちどは否定されたが，ここで述べたように，その古典場 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ を量子化して，それを演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$ とみなすことによって復活したのである．すなわち，これまでとは逆の筋道をたどって，古典場 $\psi(\boldsymbol{x},t)$ が分かっていれば，それを量子化して演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$ とみなし，これを用いて次に述べる手続きによって，多粒子系の状態関数 $\psi(q_1,q_2,\cdots,q_N;t)$ を構成してもよい．事実，第8章に述べる電磁場の量子化の手法は，この手続きによるものである．

最後に，(6.27)で定義された状態ベクトルと，(6.4)の状態関数の関係について説明しておこう．(6.37)で定義された生成演算子 $\hat{\psi}^\dagger$ と，(6.41)の真空状態 $|0\rangle$ を用いて，状態ベクトル

$$|q_1,q_2,\cdots,q_N\rangle \equiv (1/\sqrt{N!})\hat{\psi}^\dagger(q_1)\hat{\psi}^\dagger(q_2)\cdots\hat{\psi}^\dagger(q_N)|0\rangle$$

をつくり，これと(6.27)の任意の状態ベクトル $|\boldsymbol{\Psi}(t)\rangle$ の内積をとると

$$\langle q_1,q_2,\cdots,q_N|\boldsymbol{\Psi}(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\hat{\psi}(q_N)\hat{\psi}(q_{N-1})\cdots\hat{\psi}(q_1)|\boldsymbol{\Psi}(t)\rangle$$

となる．これに(6.27)を代入して，(6.17)の関係を利用すると

$$
\begin{aligned}
\langle q_1, q_2, \cdots, q_N|\Psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{m_1, m_2, \cdots, m_N}\phi_{m_1}(q_1)\phi_{m_2}(q_2)\cdots\phi_{m_N}(q_N)\\
&\quad\times\sum_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty}F(n_1, n_2, \cdots, n_\infty; t)\langle 0|\hat{a}_{m_N}\hat{a}_{m_{N-1}}\cdots\hat{a}_{m_2}\hat{a}_{m_1}|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle\\
&= \frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{m_1, m_2, \cdots, m_N}\phi_{m_1}(q_1)\phi_{m_2}(q_2)\cdots\phi_{m_N}(q_N)C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)\\
&\quad\times\sum_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty}\sqrt{\frac{N!}{n_1!n_2!\cdots n_\infty!}}\langle 0|\hat{a}_{m_N}\hat{a}_{m_{N-1}}\cdots\hat{a}_{m_2}\hat{a}_{m_1}|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle\\
&= \sum_{m_1, m_2, \cdots, m_N}C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)\phi_{m_1}(q_1)\phi_{m_2}(q_2)\cdots\phi_{m_N}(q_N)\\
&= \psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)
\end{aligned}
\tag{6.47}
$$

となる．ここで

$$
\begin{aligned}
&\sum_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty}(n_1!n_2!\cdots n_\infty!)^{-1/2}\langle 0|\hat{a}_{m_N}\hat{a}_{m_{N-1}}\cdots\hat{a}_{m_1}|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle\\
&\quad= \sum_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty}(n_1!n_2!\cdots n_\infty!)^{-1/2}\langle n_1, n_2, \cdots, n_\infty|\hat{a}_{m_1}{}^\dagger\hat{a}_{m_2}{}^\dagger\cdots\hat{a}_{m_N}{}^\dagger|0\rangle^* = 1
\end{aligned}
$$

であることを用いた．すなわち，(6.4)の状態関数は，(6.27)の状態ベクトルの位置表示にほかならない．

問50　(6.31)において，$p=q=p'=q'$ のとき

$$
(1/2)\sum_p\langle p, p|\hat{V}|p, p\rangle\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_p\hat{a}_p|\Psi(t)\rangle
$$

となることを示せ．

問51　(6.37)の ϕ_k を(6.1)のハミルトニアン K の固有関数にとったとき，状態関数

$$
\psi_{p,q}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = (1/\sqrt{2!})\langle 0|\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)|0_1, 0_2, \cdots, 1_p, \cdots, 1_q, \cdots, 0_\infty\rangle
$$

は，粒子間に相互作用のない系の対称化された固有関数を与えることを示せ．

問52　(6.43)の方程式の右辺の交換関係を計算し，(6.44)の方程式を導け．

(2)　Fermi 粒子系

Fermi 粒子系の場合には，(6.4)の展開係数 $C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)$ は，(6.9)に示したように，任意の2個の量子数 m_i と m_j のいれかえに対して反対称である．いま，量子数 m_i の値が k，m_j の値が k' であるとすると，(6.9)は

$$
C(m_1, m_2, \cdots, k, \cdots, k', \cdots, m_N; t) = -C(m_1, m_2, \cdots, k', \cdots, k, \cdots, m_N; t)
\tag{6.48}
$$

である．したがって，$k'=k$ のとき，$C(m_1, m_2, \cdots, k, \cdots, k, \cdots, m_N; t)=0$ である．すなわち，(6.48)の条件は粒子数表示では，量子数 k に属する粒子数 n_k

が0または1に限られるという条件を与える．話を分かりやすくするために，ここでも3粒子系を例にとって説明しよう．Fermi粒子のときにも，(6.4)の展開式には，(6.10)と同じ形の項が存在するが，$n_k=2$ を許す(6.11)のタイプの項は含まれていない．さて，(6.10)の3! 個の項の和から，Bose粒子系のときと同じように，量子数のとる値が大きさの順に左から右に並んでいる係数 $C(k_4, k_5, k_6; t)$ をくくり出す．Bose粒子系のときには，この約束は特別な意味をもたなかったが，Fermi粒子系では(6.48)の反対称性が反映して，これが重要な意味をもつことになる．Fermi粒子系の場合には，(6.10)は

$$
\begin{aligned}
(6.10) &= C(k_4, k_5, k_6; t) \\
&\quad \times [\phi_4(q_1)\phi_5(q_2)\phi_6(q_3) - \phi_4(q_1)\phi_6(q_2)\phi_5(q_3) \\
&\quad - \phi_5(q_1)\phi_4(q_2)\phi_6(q_3) + \phi_5(q_1)\phi_6(q_2)\phi_4(q_3) \\
&\quad + \phi_6(q_1)\phi_4(q_2)\phi_5(q_3) - \phi_6(q_1)\phi_5(q_2)\phi_4(q_3)] \\
&= C(k_4, k_5, k_6; t) \sum_{\mathrm{p}(q_1, q_2, q_3)} (-1)^{\mathrm{p}} \mathrm{P}[\phi_4(q_1)\phi_5(q_2)\phi_6(q_3)] \\
&= C(k_4, k_5, k_6; t)\sqrt{3!}\,\phi_{4,5,6}{}^{(\mathrm{A})}(q_1, q_2, q_3)
\end{aligned}
\tag{6.49}
$$

とまとめることができる．最後の等号では(1.28)を用いている．

(6.49)の例から分かるように，Fermi粒子系の(6.4)の展開式は，反対称関数 $\phi^{(\mathrm{A})}$ を用いて

$$
\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t) = \sum_{m_1<m_2<\cdots<m_N} C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)\sqrt{N!}\,\phi_{m_1, m_2, \cdots, m_N}{}^{(\mathrm{A})}(q_1, q_2, \cdots, q_N)
\tag{6.50}
$$

と表わされる．ここで粒子数表示に移るために

$$
\begin{aligned}
\phi_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty}{}^{(\mathrm{A})}(q_1, q_2, \cdots, q_N) &\equiv \phi_{m_1, m_2, \cdots, m_N}{}^{(\mathrm{A})}(q_1, q_2, \cdots, q_N), \\
F(n_1, n_2, \cdots, n_\infty; t) &\equiv \sqrt{N!}\,C(m_1, m_2, \cdots, m_N; t)
\end{aligned}
\tag{6.51}
$$

とおく．ただし右辺の量子数は $m_1<m_2<\cdots<m_N$ の順に並んでいるものとする．(6.51)を用いると，(6.50)はBose粒子系の(6.14)に対応して

$$
\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t) = \sum_{\substack{n_1, n_2, \cdots, n_\infty \\ \sum_k n_k = N}} F(n_1, n_2, \cdots, n_\infty; t)\phi_{n_1, n_2, \cdots, n_\infty}{}^{(\mathrm{A})}(q_1, q_2, \cdots, q_N)
\tag{6.52}
$$

と表わされる．このとき $\phi^{(\mathrm{A})}$ の規格化条件により

$$\sum_{\substack{n_1, n_2, \cdots, n_\infty \\ N=\sum_k n_k}} |F(n_1, n_2, \cdots, n_\infty; t)|^2 = 1 \tag{6.53}$$

である．

ここで(6.6)の係数 C に関する方程式を粒子数表示に変換しよう．このとき注意すべきことは，係数 C のなかの量子数 m_i の値を m_i' に変えたときの符号の問題である．例えば，(6.49)の係数 $C(k_4, k_5, k_6; t)$ を粒子数表示に移すと，(6.51)の定義により

$$C(k_4, k_5, k_6; t) = \frac{1}{\sqrt{3!}} F(0_1, 0_2, 0_3, 1_4, \underline{\underline{1_5}}, \underbrace{1_6, 0_7}, \underline{\underline{0_8}}, 0_9, \cdots, 0_\infty; t) \tag{6.54}$$

である．ここで k_5 を k_8 に変えると，$C(k_4, k_5, k_6; t)$ は $C(k_4, k_8, k_6, ; t)$ になる．したがって，(6.51)の定義を用いるとき，これを $C(k_4, k_6, k_8; t)$ に変えておかなくてはならない．すなわち

$$\begin{aligned} C(k_4, k_8, k_6; t) &= -C(k_4, k_6, k_8; t) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{3!}} F(0_1, 0_2, 0_3, 1_4, \underline{\underline{0_5}}, \underbrace{1_6, 0_7}, \underline{\underline{1_8}}, 0_9, \cdots, 0_\infty; t) \\ &= (-1)^{1_6+0_7} \frac{1}{\sqrt{3!}} F(0_1, 0_2, 0_3, 1_4, 0_5, 1_6, 0_7, 1_8, 0_9, \cdots, 0_\infty; t) \end{aligned}$$

である．ここで $(-1)^{1_6+0_7}$ の指数は，(6.54)の n_5 と n_8 の間にある粒子数の和である．

一般に，量子数 m_i の値を k から k' に変えると，$k'>k$ のときには

$$C(m_1, \cdots, k, \cdots, m_N; t) = \frac{1}{\sqrt{N!}} F(n_1, n_2, \cdots, \underline{\underline{n_k}}, \underbrace{n_{k+1}, \cdots, n_{k'-1}}, \underline{\underline{n_{k'}}}, \cdots, n_\infty; t) \tag{6.55}$$

が

$$\begin{aligned} C(m_1, \cdots, k', \cdots, m_N; t) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} (-1)^{n_{k+1}+\cdots+n_{k'-1}} \\ &\quad \times F(n_1, n_2, \cdots, \underline{\underline{n_k - 1}}, \underbrace{n_{k+1}, \cdots, n_{k'-1}}, \underline{\underline{n_{k'}+1}}, \cdots, n_\infty; t) \end{aligned} \tag{6.56}$$

となる．なお，(6.56)で $n_k=0$，$n_{k'}=1$ が許されないことを自動的に保証するために，この(6.56)を

$$C(m_1, \cdots, k', \cdots, m_N; t) = \frac{1}{\sqrt{N!}}(1-n_{k'})n_k(-1)^{n_{k+1}+\cdots+n_{k'-1}}$$
$$\times F(n_1, n_2, \cdots, \underline{\underline{n_k-1}}, \underbrace{n_{k+1}, \cdots, n_{k'-1}}, \underline{\underline{n_{k'}+1}}, \cdots, n_\infty; t) \tag{6.57}$$

のように表現しておくと好都合である.

なお, $k'<k$ のときには

$$C(m_1, \cdots, k', \cdots, m_N; t) = \frac{1}{\sqrt{N!}}(1-n_{k'})n_k(-1)^{n_{k'+1}+\cdots+n_{k-1}}$$
$$\times F(n_1, n_2, \cdots, n_{k'}+1, n_{k'+1}, \cdots, n_{k-1}, n_k-1, \cdots, n_\infty; t) \tag{6.58}$$

である.

(6.57)と(6.58)の右辺の符号に気を配りながら, (6.18)と同様の変形をおこなうと, (6.6)の右辺の第1項は

$$\sum_i \sum_{m_i'} \langle m_i|\hat{K}|m_i'\rangle C(m_1, m_2, \cdots, m_i', \cdots, m_N; t)$$
$$= \sum_k n_k \langle k|\hat{K}|k\rangle \frac{1}{\sqrt{N!}} F(n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty; t)$$
$$+ \sum_k \sum_{k'<k} n_k \langle k|\hat{K}|k'\rangle \frac{1}{\sqrt{N!}}(1-n_{k'})n_k(-1)^{n_{k'+1}+\cdots+n_{k-1}}$$
$$\times F(n_1, n_2, \cdots, n_{k'}+1, \cdots, n_k-1, \cdots, n_\infty; t)$$
$$+ \sum_k \sum_{k'>k} n_k \langle k|\hat{K}|k'\rangle \frac{1}{\sqrt{N!}}(1-n_{k'})n_k(-1)^{n_{k+1}+\cdots+n_{k'-1}}$$
$$\times F(n_1, n_2, \cdots, n_k-1, \cdots, n_{k'}+1, \cdots, n_\infty; t) \tag{6.59}$$

のように変換される.

ここでBose粒子系のときにならって, (6.59)を生成・消滅演算子で表現することを考える. ただし, 粒子がFermi粒子であることを考慮して, **反交換関係**

$$\{\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}^\dagger\} = \delta_{k,k'}, \qquad \{\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}\} = \{\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_{k'}^\dagger\} = 0 \tag{6.60}$$

をみたす演算子 $\hat{a}_k$ と $\hat{a}_k^\dagger$ を導入する. ここで

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$$

である. すると, (6.60)の第2式から, $\hat{a}_k^2 = \hat{a}_k^{\dagger 2} = 0$ である. また, 粒子数演算子をBose粒子系のときと同様に $\hat{n}_k \equiv \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k$ で定義すると

$$\hat{n}_k{}^2 = \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k \cdot \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k = \hat{a}_k{}^\dagger (1-\hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k)\hat{a}_k$$
$$= \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k - \hat{a}_k{}^{\dagger 2}\hat{a}_k{}^2 = \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k = \hat{n}_k \qquad (6.61)$$

である．そこでエルミート演算子 $\hat{n}_k$ の固有状態を $|n_k\rangle$ とし，固有値方程式を $\hat{n}_k|n_k\rangle = n_k|n_k\rangle$ と表わすと

$$\hat{n}_k{}^2|n_k\rangle = n_k{}^2|n_k\rangle = \hat{n}_k|n_k\rangle = n_k|n_k\rangle$$

となるから，$n_k{}^2 = n_k$．すなわち，$\hat{n}_k$ の固有値 n_k は0と1しかとれない．すなわち，(6.60)の反交換関係は，Fermi 粒子系を記述するのに適している．なお，

$$[\hat{n}_k, \hat{n}_{k'}] = \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k \cdot \hat{a}_{k'}{}^\dagger \hat{a}_{k'} - \hat{a}_{k'}{}^\dagger \hat{a}_{k'} \cdot \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k + \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_{k'}{}^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_{k'} - \hat{a}_{k'}{}^\dagger \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_{k'} \hat{a}_k$$
$$= \hat{a}_k{}^\dagger \{\hat{a}_k, \hat{a}_{k'}{}^\dagger\} \hat{a}_{k'} - \hat{a}_{k'}{}^\dagger \{\hat{a}_{k'}, \hat{a}_k{}^\dagger\} \hat{a}_k = \delta_{k,k'}(\hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_{k'} - \hat{a}_{k'}{}^\dagger \hat{a}_k)$$
$$= \delta_{k,k'}(\hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k - \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k) = 0 \qquad (6.62)$$

であるから，$\hat{a}_k$ と $\hat{a}_k{}^\dagger$ の反交換性にもかかわらず，異なる k に属するすべての $\hat{n}_k$ の同時固有状態を与えることができる．なお，上の2番目の表式の第3項と第4項は，(6.60)の反可換性を利用して，同じものを加えて引いたものである．次に

$$[\hat{n}_k, \hat{a}_k] = \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k \cdot \hat{a}_k - \hat{a}_k \cdot \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k = -\hat{a}_k \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k$$
$$= -(1-\hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k)\hat{a}_k = -\hat{a}_k,$$
$$[\hat{n}_k, \hat{a}_k{}^\dagger] = \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k \cdot \hat{a}_k{}^\dagger - \hat{a}_k{}^\dagger \cdot \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k = +\hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k \hat{a}_k{}^\dagger$$
$$= +\hat{a}_k{}^\dagger (1-\hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k) = +\hat{a}_k{}^\dagger$$

であるから，Bose 粒子系のときと同様に

$$[\hat{n}_k, \hat{a}_k] = -\hat{a}_k, \quad [\hat{n}_k, \hat{a}_k{}^\dagger] = +\hat{a}_k{}^\dagger \qquad (6.63)$$

が成立する(第2章(9.24)を参照)．(6.63)より

$$\hat{n}_k \cdot \hat{a}_k|n_k\rangle = (n_k-1)\hat{a}_k|n_k\rangle, \quad \hat{n}_k \cdot \hat{a}_k{}^\dagger|n_k\rangle = (n_k+1)\hat{a}_k{}^\dagger|n_k\rangle \qquad (6.64)$$

をえる．すなわち，$\hat{a}_k|n_k\rangle$ は $\hat{n}_k$ の固有値 (n_k-1) に属する固有ベクトルであり，$\hat{a}_k{}^\dagger|n_k\rangle$ は $\hat{n}_k$ の固有値 (n_k+1) に属する固有ベクトルである．したがって，$\hat{a}_k{}^\dagger$ と $\hat{a}_k$ はそれぞれ生成・消滅演算子である．そこで

$$\hat{a}_k|n_k\rangle = \alpha|n_k-1\rangle, \quad \hat{a}_k{}^\dagger|n_k\rangle = \beta|n_k+1\rangle$$

と書くことができる．定数 α と β は規格化条件より決まる．すなわち上の第1式の内積をとると，$\langle n_k|\hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k|n_k\rangle = |\alpha|^2\langle n_k-1|n_k-1\rangle = 1$ より $\alpha=1$ と選べる．同様にして $\beta=1$ ととることができる．そこで，n_k の値が0と1に限ら

れることを考慮して

$$\hat{a}_k|n_k\rangle = n_k|n_k-1\rangle, \quad \hat{a}_k^\dagger|n_k\rangle = (1-n_k)|n_k+1\rangle \tag{6.65}$$

と表わすことができる.

Bose 粒子系のときと同様に，量子数 m_i のとる値を $(k_1, k_2, \cdots, k_\infty)$ としたとき，それぞれの量子数の値をもつ粒子数を $n_1, n_2, \cdots, n_\infty$ として，全粒子数演算子 $\hat{N}=\sum_k \hat{n}_k$ の固有ベクトル

$$|n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty\rangle \equiv |n_1\rangle|n_2\rangle\cdots|n_k\rangle\cdots|n_\infty\rangle$$

を考える．このとき，演算子の反可換性 $\hat{a}_k^\dagger\hat{a}_{k'}^\dagger=-\hat{a}_{k'}^\dagger\hat{a}_k^\dagger$ のため，上の固有ベクトルの符号に注意する必要がある．ここでは，これまでの約束にならって，この直積状態を k の値の低いものから高いものへ，左から右へ並べて

$$|n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty\rangle \equiv (\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{n_2}\cdots(\hat{a}_k^\dagger)^{n_k}\cdots(\hat{a}_\infty^\dagger)^{n_\infty}|0\rangle \tag{6.66}$$

と定義する．ここで

$$|0\rangle \equiv |0_1, 0_2, \cdots, 0_k, \cdots, 0_\infty\rangle$$

は粒子が1個も存在しない真空状態である．(6.66)に消滅演算子 $\hat{a}_k$ を作用させると，(6.60)と(6.65)から

$$\begin{aligned}
&\hat{a}_k|n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty\rangle \\
&= \hat{a}_k(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}(\hat{a}_2^\dagger)^{n_2}\cdots(\hat{a}_{k-1}^\dagger)^{n_{k-1}}|0_1, 0_2, \cdots, 0_{k-1}, n_k, n_{k+1}, \cdots, n_\infty\rangle \\
&= (-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{k-1}}(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}\cdots(\hat{a}_{k-1}^\dagger)^{n_{k-1}}\hat{a}_k|0_1, 0_2, \cdots, 0_{k-1}, n_k, n_{k+1}, \cdots, n_\infty\rangle \\
&= (-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{k-1}}n_k(\hat{a}_1^\dagger)^{n_1}\cdots(\hat{a}_{k-1}^\dagger)^{n_{k-1}}|0_1, 0_2, \cdots, 0_{k-1}, n_k-1, n_{k+1}, \cdots, n_\infty\rangle \\
&= (-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{k-1}}n_k|n_1, n_2, \cdots, n_k-1, \cdots, n_\infty\rangle
\end{aligned} \tag{6.67}$$

となる．$n_k=0$ のときには

$$\hat{a}_k|n_1, n_2, \cdots, 0_k, \cdots, n_\infty\rangle = 0$$

である．同様にして

$$\begin{aligned}
&\hat{a}_k^\dagger|n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty\rangle \\
&\quad = (-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{k-1}}(1-n_k)|n_1, n_2, \cdots, n_k+1, \cdots, n_\infty\rangle
\end{aligned} \tag{6.68}$$

であり，$n_k=1$ のときには

$$\hat{a}_k^\dagger|n_1, n_2, \cdots, 1_k, \cdots, n_\infty\rangle = 0.$$

次に(6.66)に $\hat{a}_k^\dagger$ と $\hat{a}_{k'}$ の2個の演算子を作用させたときを調べておこう．そのとき0にならないのは，$n_k=0$ で $n_{k'}=1$ のときだけである．そこでまず $k'<k$ のときを計算する．このとき

$$\hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_{k'} | n_1, n_2, \cdots, 1_{k'}, \cdots, 0_k, \cdots, n_\infty \rangle$$
$$= \hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_{k'} (\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2{}^\dagger)^{n_2} \cdots (\hat{a}_{k'-1}{}^\dagger)^{n_{k'-1}} | 0_1, 0_2, \cdots, 0_{k'-1}, 1_{k'}, n_{k'+1}, \cdots, 0_k, \cdots, n_\infty \rangle$$
$$= \hat{a}_k{}^\dagger (-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{k'-1}} (\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1} (\hat{a}_2{}^\dagger)^{n_2} \cdots (\hat{a}_{k'-1}{}^\dagger)^{n_{k'-1}}$$
$$\times \hat{a}_{k'} | 0_1, 0_2, \cdots, 0_{k'-1}, 1_{k'}, n_{k'+1}, \cdots, 0_k, \cdots, n_\infty \rangle$$
$$= n_{k'} (-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{k'-1}} \hat{a}_k{}^\dagger (\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1} \cdots (\hat{a}_{k'-1}{}^\dagger)^{n_{k'-1}}$$
$$\times | 0_1, 0_2, \cdots, 0_{k'-1}, 0_{k'}, n_{k'+1}, \cdots, 0_k, \cdots, n_\infty \rangle$$
$$= n_{k'} (-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{k'-1}} \hat{a}_k{}^\dagger (\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1} \cdots (\hat{a}_{k'-1}{}^\dagger)^{n_{k'-1}} \cdot (\hat{a}_{k'+1}{}^\dagger)^{n_{k'+1}} \cdots (\hat{a}_{k-1}{}^\dagger)^{n_{k-1}}$$
$$\times | 0_1, 0_2, \cdots, 0_{k'}, 0_{k'+1}, \cdots, 0_{k-1}, 0_k, n_{k+1}, \cdots, n_\infty \rangle$$
$$= n_{k'} (-1)^{n_1+n_2+\cdots+n_{k'-1}} \cdot (-1)^{(n_1+n_2+\cdots+n_{k'-1})+(n_{k'+1}+\cdots+n_{k-1})}$$
$$\times (\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1} \cdots (\hat{a}_{k'-1}{}^\dagger)^{n_{k'-1}} \cdot (\hat{a}_{k'+1}{}^\dagger)^{n_{k'+1}} \cdots (\hat{a}_{k-1}{}^\dagger)^{n_{k-1}}$$
$$\times \hat{a}_k{}^\dagger | 0_1, 0_2, \cdots, 0_k, n_{k+1}, \cdots, n_\infty \rangle$$
$$= n_{k'} (1-n_k) (-1)^{n_{k'+1}+\cdots+n_{k-1}} (\hat{a}_1{}^\dagger)^{n_1} \cdots (\hat{a}_{k'-1}{}^\dagger)^{n_{k'-1}} \cdot (\hat{a}_{k'+1}{}^\dagger)^{n_{k'+1}} \cdots (\hat{a}_{k-1}{}^\dagger)^{n_{k-1}}$$
$$\times | 0_1, 0_2, \cdots, 0_{k'}, \cdots, 1_k, n_{k+1}, \cdots, n_\infty \rangle$$
$$= n_{k'} (1-n_k) (-1)^{n_{k'+1}+\cdots+n_{k-1}} | n_1, n_2, \cdots, 0_{k'}, \cdots, 1_k, \cdots, n_\infty \rangle$$

となる．あるいは一般に，次のように表わしてもよい．

$$\hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_{k'} | n_1, n_2, \cdots, n_{k'}, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty \rangle$$
$$= n_{k'} (1-n_k) (-1)^{n_{k'+1}+\cdots+n_{k-1}} | n_1, n_2, \cdots, n_{k'}-1, \cdots, n_k+1, \cdots, n_\infty \rangle. \tag{6.69}$$

$k<k'$ のときにも，上と同様の計算により

$$\hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_{k'} | n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_{k'}, \cdots, n_\infty \rangle$$
$$= n_{k'} (1-n_k) (-1)^{n_{k+1}+\cdots+n_{k'-1}} | n_1, n_2, \cdots, n_k+1, \cdots, n_{k'}-1, \cdots, n_\infty \rangle \tag{6.70}$$

をえる．$k=k'$ のときには

$$\hat{a}_k{}^\dagger \hat{a}_k | n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty \rangle = n_k | n_1, n_2, \cdots, n_k, \cdots, n_\infty \rangle \tag{6.71}$$

である．

ここで，(6.27)と同様に任意の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ を

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{\substack{n_1, n_2, \cdots, n_\infty \\ \sum n_k = N}} F(n_1, n_2, \cdots, n_\infty; t) | n_1, n_2, \cdots, n_\infty \rangle \tag{6.72}$$

で定義し，$|n_1, n_2, \cdots, n_\infty\rangle$ を(6.59)の右辺に掛けて，$n_1, n_2, \cdots, n_\infty$ に関する

和をとると，その第1項は(6.71)により

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{n_1,n_2,\cdots,n_\infty}\sum_k n_k\langle k|\hat{K}|k\rangle F(n_1,n_2,\cdots,n_k,\cdots,n_\infty;t)|n_1,n_2,\cdots,n_\infty\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_k\langle k|\hat{K}|k\rangle\hat{a}_k{}^\dagger\hat{a}_k|\Psi(t)\rangle \tag{6.73}$$

と表わされる．次に(6.59)の右辺の第2項($k'<k$)からの寄与は

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{n_1,n_2,\cdots,n_\infty}\sum_k\sum_{k'<k}\langle k|\hat{K}|k'\rangle n_k{}^2(1-n_{k'})(-1)^{n_{k'+1}+\cdots+n_{k-1}}$$

$$\times F(n_1,n_2,\cdots,n_{k'}+1,\cdots,n_k-1,\cdots,n_\infty;t)|n_1,n_2,\cdots,n_{k'},\cdots,n_k,\cdots,n_\infty\rangle$$

である．ここで $n_k{}^2=n_k$ に注意し，$n_{k'}+1=\bar{n}_{k'}$，$n_k-1=\bar{n}_k$ とおきかえると，上の表式は

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{n_1,n_2,\cdots,n_\infty}\sum_k\sum_{k'<k}\langle k|\hat{K}|k'\rangle\bar{n}_{k'}(1-\bar{n}_k)(-1)^{n_{k'+1}+\cdots+n_{k-1}}$$

$$\times F(n_1,n_2,\cdots,\bar{n}_{k'},\cdots,\bar{n}_k,\cdots,n_\infty;t)|n_1,n_2,\cdots,\bar{n}_{k'}-1,\cdots,\bar{n}_k+1,\cdots,n_\infty\rangle$$

となる．ここで $\bar{n}_{k'}=1$，$\bar{n}_k=0$ だけが可能なことを考慮して $(2-\bar{n}_{k'})(1+\bar{n}_k)$ をそれと等価な $\bar{n}_{k'}(1-\bar{n}_k)$ におきかえている．これを(6.69)と比較すると

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{n_1,n_2,\cdots,n_\infty}\sum_k\sum_{k'<k}\langle k|\hat{K}|k'\rangle$$

$$\times F(n_1,n_2,\cdots,\bar{n}_{k'},\cdots,\bar{n}_k,\cdots,n_\infty;t)\hat{a}_k{}^\dagger\hat{a}_{k'}|n_1,n_2,\cdots,\bar{n}_{k'},\cdots,\bar{n}_k,\cdots,n_\infty\rangle$$

$$=\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{k'<k}\langle k|\hat{K}|k'\rangle\hat{a}_k{}^\dagger\hat{a}_{k'}|\Psi(t)\rangle \tag{6.74}$$

がえられる．(6.59)の第3項からの寄与も，(6.70)によって，(6.74)と同じ形となり，結局(6.59)の全体の寄与が，k と k' の任意の値に対して

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{k,k'}\langle k|\hat{K}|k'\rangle\hat{a}_k{}^\dagger\hat{a}_{k'}|\Psi(t)\rangle \tag{6.75}$$

と表わされる．

次に(6.6)の右辺の第2項の

$$\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\sum_{m_i',m_j'}\langle m_i,m_j|\hat{V}|m_i',m_j'\rangle C(m_1,m_2,\cdots,m_i',\cdots,m_j',\cdots,m_N;t) \tag{6.76}$$

において，まず粒子の番号 i と j に関する和の $i\neq j$ の制限について注意しておこう．ここで，(6.20)の最後の表式を見ると，Fermi 粒子系の場合には状態 $\langle p,p|$ は存在しない．したがって，$i\neq j$ の制限は $p\neq q$ の制限を与える．同様に $m_i{}'=p'$，$m_j{}'=q'$ のとき，$p'\neq q'$ である．さて，$m_i=p$，$m_j=q$ のとき

$$C(m_1,m_2,\cdots,m_i,\cdots,m_j,\cdots,m_N;t)=C(m_1,m_2,\cdots,p,\cdots,q,\cdots,m_N;t)$$

において，$m_1<m_2<\cdots<p<\cdots<q<\cdots<m_N$ の順序に並んでいるとする．ここで p を p' に，q を q' に変えたとき，新しい p' と q' の値が，上の順序のどの位置を占めるかによっていろいろな場合がある．ここでは例えば，$p'<q'<p<q$ の順になっている場合について詳しく調べる．その結論はほかの順序の場合にも成り立つからである．さて，量子数の値 p と q が，それぞれ p' と q' に変わるとき，はじめの状態は $n_p=1$，$n_q=1$，$n_{p'}=0$，$n_{q'}=0$ の状態でなければならない．したがって，

$$\begin{aligned}&C(m_1,m_2,\cdots,p,\cdots,q,\cdots,m_N;t)\\&\quad=\frac{1}{\sqrt{N!}}F(n_1,n_2,\cdots,0_{p'},\cdots,0_{q'},\cdots,1_p,\cdots,1_q,\cdots,n_\infty;t)\end{aligned}\tag{6.77}$$

である．ここでまず p を p' に変えると

$$\begin{aligned}&C(m_1,m_2,\cdots,p',\cdots,q,\cdots,m_N;t)\\&\quad=\frac{1}{\sqrt{N!}}(1-n_{p'})n_p(-1)^{(n_{p'+1}+\cdots+n_{q'-1})+0_{q'}+(n_{q'+1}+\cdots+n_{p-1})}\\&\qquad\times F(n_1,n_2,\cdots,\underline{\underline{1_{p'}}},\underbrace{\cdots,0_{q'},\cdots},\underline{\underline{0_p}},\cdots,1_q,\cdots,n_\infty;t)\end{aligned}\tag{6.78}$$

となる．ここで符号 (-1) の指数は，$(p'+1)$ 番目から $(p-1)$ 番目までの量子数をもつ粒子数の和である．次に(6.78)の左辺の q を q' に変えると

$$\begin{aligned}&C(m_1,m_2,\cdots,p',\cdots,q',\cdots,m_N;t)\\&\quad=\frac{1}{\sqrt{N!}}(1-n_{p'})n_p(1-n_{q'})n_q\\&\qquad\times(-1)^{(n_{p'+1}+\cdots+n_{q'-1})+0_{q'}+(n_{q'+1}+\cdots+n_{p-1})}\cdot(-1)^{(n_{q'+1}+\cdots+n_{p-1})+0_p+(n_{p+1}+\cdots+n_{q-1})}\\&\qquad\times F(n_1,n_2,\cdots,1_{p'},\cdots,\underline{\underline{1_{q'}}},\underbrace{\cdots,0_p,\cdots},\underline{\underline{0_q}},\cdots,n_\infty;t)\\&\quad=\frac{1}{\sqrt{N!}}(1-n_{p'})n_p(1-n_{q'})n_q(-1)^{n_{p'+1}+\cdots+n_{q'-1}}\cdot(-1)^{n_{p+1}+\cdots+n_{q-1}}\\&\qquad\times F(n_1,n_2,\cdots,\underline{\underline{1_{p'}}},\underbrace{\cdots},\underline{\underline{1_{q'}}},\cdots,\underline{\underline{0_p}},\underbrace{\cdots},\underline{\underline{0_q}},\cdots,n_\infty;t)\end{aligned}\tag{6.79}$$

となる．すなわち，2個の変数 p と q を p' と q' にいれかえるとき，粒子数表示に現われる符号(-1)の指数は，(p,q,p',q') をその大きさの順に並べたときの，左側の1対と，右側の1対の変数の間の粒子数の和で与えられる．そこで，(6.76)の粒子数表示をとって，右側から状態ベクトル $|n_1,n_2,\cdots,n_\infty\rangle$ を掛けて $n_1,n_2,\cdots,n_\infty$ に関する和をとる．そのとき，$p'<q'<p<q$ の順序で並んでいる部分は

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{p'<q'<p<q}\langle p,q|\hat{V}|p',q'\rangle F(n_1,n_2,\cdots,n_{p'}+1,\cdots,n_{q'}+1,\cdots,n_p-1,\cdots,n_q-1,\cdots,n_\infty;t)$$
$$\times n_p n_q(1-n_{p'})(1-n_{q'})(-1)^{n_{p'+1}+\cdots+n_{q'-1}}\cdot(-1)^{n_{p+1}+\cdots+n_{q-1}}$$
$$\times|n_1,n_2,\cdots,n_{p'},\cdots,n_{q'},\cdots,n_p,\cdots,n_q,\cdots,n_\infty\rangle$$

の形の項からなる．ここで $n_{p'}+1=\bar{n}_{p'}$, $n_{q'}+1=\bar{n}_{q'}$, $n_p-1=\bar{n}_p$, $n_q-1=\bar{n}_q$ とおきかえると，上の表式は

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{p'<q'<p<q}\langle p,q|\hat{V}|p',q'\rangle F(n_1,n_2,\cdots,\bar{n}_{p'},\cdots,\bar{n}_{q'},\cdots,\bar{n}_p,\cdots,\bar{n}_q,\cdots,n_\infty;t)$$
$$\times\bar{n}_{p'}\bar{n}_{q'}(1-\bar{n}_p)(1-\bar{n}_q)(-1)^{n_{p'+1}+\cdots+n_{q'-1}}\cdot(-1)^{n_{p+1}+\cdots+n_{q-1}}$$
$$\times|n_1,n_2,\cdots,\bar{n}_{p'}-1,\cdots,\bar{n}_{q'}-1,\cdots,\bar{n}_p+1,\cdots,\bar{n}_q+1,\cdots,n_\infty\rangle \qquad (6.80)$$

となる．一方ここで，$p'<q'<p<q$ の順序のとき

$$\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_q{}^\dagger\hat{a}_{q'}\hat{a}_{p'}|n_1,n_2,\cdots,n_{p'},\cdots,n_{q'},\cdots,n_p,\cdots,n_q,\cdots,n_\infty\rangle$$

を計算しよう．このとき，この状態ベクトルが0でないのは，$n_{p'}=n_{q'}=1$, $n_p=n_q=0$ のときだけである．そこで(6.69)と同様の手続きにより

$$\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_q{}^\dagger\hat{a}_{q'}\hat{a}_{p'}|n_1,n_2,\cdots,1_{p'},\cdots,1_{q'},\cdots,0_p,\cdots,0_q,\cdots,n_\infty\rangle$$
$$=n_{p'}n_{q'}(1-n_q)(1-n_p)(-1)^{n_{p'+1}+\cdots+n_{q'-1}}\cdot(-1)^{n_{p+1}+\cdots+n_{q-1}}$$
$$\times|n_1,n_2,\cdots,n_{p'}-1,\cdots,n_{q'}-1,\cdots,n_p+1,\cdots,n_q+1,\cdots,n_\infty\rangle \qquad (6.81)$$

をえる．これを(6.80)に代入し，$n_1,n_2,\cdots,n_\infty$ に関する和をとると，

$$\frac{1}{\sqrt{N!}}\sum_{p'<q'<p<q}\langle p,q|\hat{V}|p',q'\rangle\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_q{}^\dagger\hat{a}_{q'}\hat{a}_{p'}|\Psi(t)\rangle \qquad (6.82)$$

となる．同様のことを (p,q,p',q') の他の順序で行うと，(6.82)がすべての順序に対して成立することが確かめられる．その結果と，(6.75)をまとめると，(6.6)の方程式は，粒子数表示で

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{H}|\Psi(t)\rangle,$$
$$\hat{H} = \sum_{k,k'}\langle k|\hat{K}|k'\rangle\hat{a}_k{}^\dagger\hat{a}_{k'} + \frac{1}{2}\sum_{\substack{p,q\\p',q'}}\langle p,q|\hat{V}|p',q'\rangle\hat{a}_p{}^\dagger\hat{a}_q{}^\dagger\hat{a}_{q'}\hat{a}_{p'} \tag{6.83}$$

で表わされる．この形はBose粒子系の場合の(6.33)と全く同じである．ただし，Fermi粒子系のときには，演算子 $\hat{a}_k$ と $\hat{a}_k{}^\dagger$ は反交換関係(6.60)をみたす．これがBose粒子系のときとの違いである．なお，Bose粒子系のときには，(6.83)のハミルトニアンの最後の項の $\hat{a}_{q'}\hat{a}_{p'}$ の順序などはどうでもよかったが，Fermi粒子系の場合には，その順序を逆にすると符号が変わってしまうことに注意しよう．

Fermi粒子系でも，場の演算子 $\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$ と $\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})$ を

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) = \sum_k \hat{a}_k\phi_k(\boldsymbol{x}), \qquad \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}) = \sum_k \hat{a}_k{}^\dagger\phi_k{}^*(\boldsymbol{x}) \tag{6.84}$$

で定義すると，(6.60)より反交換関係

$$\{\hat{\psi}(\boldsymbol{x}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')\} = \delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'), \qquad \{\hat{\psi}(\boldsymbol{x}),\hat{\psi}(\boldsymbol{x}')\} = \{\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')\} = 0 \tag{6.85}$$

をえる．(6.83)のハミルトニアンを(6.84)を用いて表わすと

$$\hat{H} = \int_{-\infty}^{\infty}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + U(\boldsymbol{x})\right]\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x$$
$$+\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}')V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\mathrm{d}^3x'\mathrm{d}^3x \tag{6.86}$$

となる．

ここでSchrödinger表示から，Heisenberg表示に移る．このときにも，(6.42)と同様に

$$\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\psi}(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}, \qquad \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\mathrm{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

と変換する．これを時間 t で微分すると，Heisenbergの運動方程式として

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} = [\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\hat{H}] \tag{6.87}$$

がえられる．このとき右辺の交換関係は反交換関係 $\{\ ,\ \}$ ではないことに注意されたい．(6.85)の反交換関係を用いて，(6.87)の右辺を計算すると，この場

合も(6.44)と同形の方程式

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle + U(\boldsymbol{x})\right)\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t) + \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^3x'\,V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t) \quad (6.88)$$

をえる.

最後に(6.72)で定義した状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ と状態関数 $\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t)$ の間には，Bose 粒子系のときと同様に

$$\psi(q_1, q_2, \cdots, q_N; t) = \frac{1}{\sqrt{N!}}\langle 0|\hat{\psi}(q_N)\hat{\psi}(q_{N-1})\cdots\hat{\psi}(q_1)|\Psi(t)\rangle \quad (6.89)$$

の関係があることを注意しておこう.

問 53　反交換関係をみたす演算子 $\hat{\psi}=\sum_k \hat{a}_k\phi_k$ において，ϕ_k をハミルトニアン K の固有関数に選んだとき，

$$\psi_{p,q}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = (1/\sqrt{2!})\langle 0|\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_1)\hat{\psi}(\boldsymbol{r}_2)|0_1, 0_2, \cdots, 1_q, \cdots, 1_p, \cdots, 0_\infty\rangle$$

が，粒子間に相互作用のない2粒子系の反対称化された固有関数を与えることを示せ.

問 54　スピン-軌道相互作用 $\xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{s}$ を第2量子化された形式で表現せよ.

問 55　(6.85)の反交換関係を用いて，(6.87)の右辺を計算して，(6.88)の運動方程式を導出せよ.

第7章

散乱の一般論

§1 S-行列

量子力学的粒子の散乱問題については，すでに第3章と第5章で述べた．第3章§5では，中心力ポテンシャルの作用のもとにある1粒子系の定常状態のSchrödinger方程式を，散乱現象に適応した境界条件をみたす積分方程式に書きかえ，その近似解を求めることにより，散乱断面積を求めた．その近似法の一つがBorn近似であった．一方，第5章§2では，同じ散乱問題を，入射粒子の状態が摂動相互作用によって別の状態に転移する現象としてとらえて，時間に依存するSchrödinger方程式を摂動の第1近似で解いた．ところが，この摂動近似によりえられた結果は，第3章のBorn近似にもとづく結果と完全に一致した．これらの全く異なる二つの方法による結果の一致は偶然のことなのだろうか．また，時間に依存する摂動近似の方法では，ポテンシャルによる弾性散乱だけでなく，より複雑な非弾性散乱をも扱うことができた．第3章の時間によらない定常的な方法では，このようなより広い範囲の問題を扱うことはできないのであろうか．このような疑問にこたえるのが，この章で展開する散乱の一般論である．

散乱現象を状態の転移としてとらえる第5章§2の考え方は，摂動論のような近似的理論に関係なく，量子力学全般にわたって適用される基本的なものの考え方である．この考え方を，摂動論のような近似的方法によらずに，より一般的な立場にもとづいて散乱問題に適用し，その結果として第3章の定常的理論を一般的な形で導く．そのような理論の出発点となるのが，ここで説明するS-行列の理論である．議論の内容を明確にするために，2個の異なる粒子，例えば中性子と陽子が衝突する過程を想定しながら話を進めよう．これらの2個

の粒子は，はじめは十分に遠くに離れていて，粒子間に相互作用はなく，それぞれ独立に自由運動をしている．時間の経過とともにそれらの粒子はたがいに近づいてきて，相互作用を及ぼしあって衝突し，やがて再び遠ざかって自由な粒子として散乱されてゆく．このような散乱過程を時間的に追跡しようとするとき，第2章§5(4)で導入した相互作用表示の理論を利用すると見通しがよい．全系のハミルトニアンを $\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ としよう．ここで $\hat{H}_0$ は2個の自由粒子のハミルトニアンで，$\hat{V}$ はその間の相互作用のハミルトニアンである．この表示での基本方程式である Tomonaga-Schwinger の方程式は

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\psi_I(t)\rangle}{\mathrm{d}t}=\hat{V}_I(t)|\psi_I(t)\rangle, \tag{1.1}$$

$$\hat{V}_I(t)=\mathrm{e}^{i\hat{H}_0t/\hbar}\hat{V}\mathrm{e}^{-i\hat{H}_0t/\hbar} \tag{1.2}$$

で与えられる．ここで，右辺の $\hat{V}$ と $\hat{H}_0$ は Schrödinger 表示の演算子である．時刻 t' と時刻 t における相互作用表示の状態ベクトル $|\psi_I(t')\rangle$ と $|\psi_I(t)\rangle$ を結ぶユニタリー演算子を $\hat{U}(t,t')$ とし

$$|\psi_I(t)\rangle=\hat{U}(t,t')|\psi_I(t')\rangle \tag{1.3}$$

とおくと，演算子 $\hat{U}(t,t')$ は第2章(5.56)，(5.59)にあるように

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,t')}{\partial t}&=\hat{V}_I(t)\hat{U}(t,t'),\\ i\hbar\frac{\partial\hat{U}(t,t')}{\partial t'}&=-\hat{U}(t,t')\hat{V}_I(t') \end{aligned} \tag{1.4}$$

をみたす．(1.4)の微分方程式は，それぞれ

$$\hat{U}(t,t')=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}\hat{V}_I(t'')\hat{U}(t'',t')\mathrm{d}t'', \tag{1.5}$$

$$\hat{U}(t,t')=1-\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t}\hat{U}(t,t'')\hat{V}_I(t'')\mathrm{d}t'' \tag{1.6}$$

の積分方程式に書きかえられる．

なお，(1.3)のユニタリー演算子 $\hat{U}(t,t')$ は，第2章(5.54)にあるように，Schrödinger 表示の演算子 $\hat{H}_0$ と $\hat{H}$ を用いて

$$\hat{U}(t,t')=\mathrm{e}^{i\hat{H}_0t/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\hat{H}(t-t')/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{-i\hat{H}_0t'/\hbar} \tag{1.7}$$

と表わされる．また(1.7)から

$$\hat{U}(t,t'') = \hat{U}(t,t')\cdot\hat{U}(t',t''),$$
$$\hat{U}^{\dagger}(t',t) = \hat{U}(t,t'), \tag{1.8}$$
$$\hat{U}^{\dagger}(t,t')\cdot\hat{U}(t,t') = \hat{U}(t,t')\cdot\hat{U}^{\dagger}(t,t') = 1$$

が成立する．

さて，衝突前の初状態の時刻としては，事実上無限の過去の時刻 $t'=-\infty$ をとることができる．その時刻 $t'=-\infty$ には，2個の入射粒子は十分に遠くに離れていて，その間に相互作用はないと考えられる．ただし，粒子間の相互作用は，粒子間の距離 r の逆数 $1/r$ よりもはやく消えるものとする．したがって，粒子間に Coulomb 力が作用する場合には，以下の理論はそのままでは適用できない．この条件をみたすかぎり，$t'=-\infty$ における状態として，自由ハミルトニアン $\hat{H}_0$ の固有状態を選ぶことができる．すなわち，$t'=-\infty$ において系の状態ベクトルを

$$|\psi_I(t'=-\infty)\rangle = |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle,$$
$$\hat{H}_0|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle = E_i|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle \tag{1.9}$$

と設定しておく．ここで固有ベクトル $|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$ は

$$\langle\boldsymbol{\Phi}_i|\boldsymbol{\Phi}_j\rangle = \delta_{i,j} \tag{1.10}$$

の直交規格化条件をみたすものとする．このとき(1.3)は

$$|\psi_I(t)\rangle = \hat{U}(t,-\infty)|\psi_I(-\infty)\rangle = \hat{U}(t,-\infty)|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle \tag{1.11}$$

となる．この表式は，はじめ時刻 $t'=-\infty$ において状態 $|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$ にあった系が，時刻 t においては，相互作用 $\hat{V}_I(t)$ の影響によって状態 $|\psi_I(t)\rangle$ に変わっていることを表わすものである．

2粒子の衝突が終わり，それらの粒子がたがいに遠くに離れた時刻を $t=+\infty$ とすると，その状態は

$$|\psi_I(+\infty)\rangle = \hat{U}(+\infty,-\infty)|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle \tag{1.12}$$

で与えられる．(1.12)によって形成された状態ベクトル $|\psi_I(+\infty)\rangle$ を，$\hat{H}_0$ の固有ベクトルの完全系 $\{|\boldsymbol{\Phi}_j\rangle\}$ で展開し，その展開係数を $S_{j,i}$ と書くと

$$|\psi_I(+\infty)\rangle = \sum_j |\boldsymbol{\Phi}_j\rangle S_{j,i} \tag{1.13}$$

である．したがって，終状態 $|\psi_I(+\infty)\rangle$ において，$\hat{H}_0|\boldsymbol{\Phi}_f\rangle=E_f|\boldsymbol{\Phi}_f\rangle$ で与えられる状態 $|\boldsymbol{\Phi}_f\rangle$ に系を発見する確率振幅は

$$\langle \boldsymbol{\Phi}_f | \psi_I(+\infty) \rangle = \langle \boldsymbol{\Phi}_f | \hat{U}(+\infty, -\infty) | \boldsymbol{\Phi}_i \rangle$$
$$= \sum_j \langle \boldsymbol{\Phi}_f | \boldsymbol{\Phi}_j \rangle S_{j,i} = \sum_j \delta_{f,j} S_{j,i} = S_{f,i}$$

である．すなわち

$$S_{f,i} = \langle \boldsymbol{\Phi}_f | \hat{U}(+\infty, -\infty) | \boldsymbol{\Phi}_i \rangle \tag{1.14}$$

は，時刻 $t'=-\infty$ に $\hat{H}_0$ の固有状態 $|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$ にあった体系が，相互作用 $\hat{V}_I(t)$ の作用によって，時刻 $t=+\infty$ において $\hat{H}_0$ の固有状態 $|\boldsymbol{\Phi}_f\rangle$ に転移する確率振幅を与える．この $S_{f,i}$ を **S-行列**，または散乱の行列(scattering matrix)といい，$\hat{S}=\hat{U}(+\infty, -\infty)$ を **S-演算子**という．S-行列が求まれば，その絶対値の2乗をとることにより，状態 $|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$ から状態 $|\boldsymbol{\Phi}_f\rangle$ への転移確率が求まり，これより散乱断面積が計算できる．したがって，散乱現象を状態の転移としてとらえるいまの立場において，S-行列はその中心的な役割をになう重要な物理量となるのである．

(1)　相互作用のスイッチ・オフ

上の議論では，時刻 $t=\pm\infty$ においては，粒子間に相互作用はなく，したがって，初状態 $|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$ と終状態 $|\boldsymbol{\Phi}_f\rangle$ を自由ハミルトニアン $\hat{H}_0$ の固有状態によって指定できることが話の前提となっている．しかし，2個の粒子の状態が $\hat{H}_0$ の固有状態，すなわち平面波で表わされているとすると，それらの波動関数は無限に広い空間領域にひろがっていて，二つの粒子の波動関数は必然的に重なり合うことになる．重なり合った状態にある粒子間には相互作用がはたらくはずである．すなわち，初状態と終状態が $\hat{H}_0$ の固有状態で与えられるという仮定と，そのとき粒子間に相互作用はないとする仮定はたがいに矛盾するのである．このことは，数学的には，(1.7)の演算子 $\hat{U}(t, t')$ に $\hat{H}_0$ の固有ベクトルを作用させたとき，$t=\pm\infty$ の極限が存在しないことに対応している．つまり，$\hat{H}_0$ の固有状態 $|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$ を(1.7)の右側から掛けると，$\exp[-iE_i t'/\hbar]$ の因子が現われ，これは明らかに $t'\to-\infty$ の極限で収束しない．一方，問題の物理的状況を考えると，スリットから入射してくる粒子の波動関数は決して厳密な平面波，すなわち $\hat{H}_0$ の純粋な固有状態ではなく，ある一定の空間的ひろがりをもつ波束，すなわち $\hat{H}_0$ の固有状態の重ね合わせである．このように，初状態は十分に遠くに離れた2個の波束で表わされ，したがってそのとき粒子間に相互

作用ははたらかない．相互作用がはたらくのは，これらの 2 個の波束が重なり合ったときだけである．そこで，上に述べた矛盾を避けるには，初状態と終状態を $\hat{H}_0$ の正確な固有状態で指定せずに，それらの適当な重ね合わせである波束を用いればよいことになる．

このように $\hat{H}_0$ の固有状態ではなく，固有状態の重ね合わせとしての波束を利用して理論を構成することはもちろん可能である．しかしそうすると，以下の計算がひどく複雑なものになってしまう．この欠点を避ける方法として考えられたのが，**相互作用のスイッチ・オフ**(switch-off)という操作である．それは，初状態と終状態を $\hat{H}_0$ の正確な固有状態で指定する代償として，相互作用 $\hat{V}_I(t)$ そのものが時刻 $t=\pm\infty$ で消失するとする操作である．この操作をある特定の時刻 $t=\pm T_0$ で行うと，その時刻が確定しているため，不確定性関係 $\Delta E\cdot\Delta t\sim\hbar$ により，体系のもつエネルギーの値に大きな不確定性をもたらすことになる．そのような不確定性を避けるには，相互作用がいつスイッチ・オフされたかをできるだけ不明確にしておけばよい．このようなスイッチ・オフの操作を**断熱的スイッチ・オフ**(adiabatic switch-off)という．ここで断熱的という言葉を用いたが，それは系の状態を乱さないように十分にゆっくりという意味であるから，むしろ熱力学で用いられる準静的(quasi-static)といったほうがよい．しかし，習慣的に断熱的という用語が用いられるので，ここでもこの言葉を用いることにする．

相互作用の断熱的スイッチ・オフの操作を理論に導入するためのもっとも直接的な方法としては，(1.1)の Tomonaga-Schwinger の方程式の右辺の相互作用 $\hat{V}_I(t)$ を $\exp[-\varepsilon|t|/\hbar]\hat{V}_I(t)$ におきかえることであろう．ここで ε は無限小の正のパラメーターであり，すべての計算の終了した段階で $\varepsilon\to 0$ の極限をとるものとする．しかし，数式の繁雑さを避けるために，この極限操作を示す $\lim_{\varepsilon\to 0}$ の記号は省略する．上のおきかえをしたとき，(1.5)で $t'\to-\infty$ にしたときの演算子 $\hat{U}(t,-\infty)$ のみたす積分方程式は

$$\hat{U}(t,-\infty)=1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\hat{V}_I(t')\hat{U}(t',-\infty)\mathrm{d}t' \qquad (1.15)$$

である．(1.15)をみると，スイッチ・オフの操作により新しく定義された演算子 $\hat{U}(t,-\infty)$ が右辺にも現われている．これは非常に都合がわるい．なぜな

ら，$\hat{U}(t, -\infty)$ の内容は(1.15)の積分方程式を正確に解いたときにはじめて分かるという具合になっているからである．しかも，(1.15)の積分方程式を解くといっても，(1.15)を逐次に展開する以外にほとんど他に方法がなく，しかもその展開が収束するという保証もない．

そこで，この困難を克服するために，本書では，$t'=\pm\infty$ のときの演算子 $\hat{U}(t, \mp\infty)$ などを，次式で定義する方法を採用することにする．すなわち

$$\hat{U}(t, \mp\infty) \equiv 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{\mp\infty}^{t} \hat{U}(t, t')\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\hat{V}_I(t')\mathrm{d}t', \qquad (1.16)$$

$$\hat{U}(\pm\infty, t) \equiv 1 + \frac{i}{\hbar}\int_{\pm\infty}^{t} \mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\hat{V}_I(t')\hat{U}(t', t)\mathrm{d}t'. \qquad (1.17)$$

(1.16)の定義は，(1.5)ではなく，(1.6)の積分方程式で $t'=\mp\infty$ とおき，右辺に収束因子 $\exp[-\varepsilon|t|/\hbar]$ を追加したものである．これらの定義式の右辺には，定義されるべき $\hat{U}(t, \mp\infty)$ などが右辺に含まれていない．右辺の $\hat{U}(t, t')$ などは，(1.5)，(1.6)あるいは(1.7)によってすでに与えられている．つまり，(1.15)に代わる(1.16)や(1.17)の定義式では，定義されるものがすでに定義されているもので表わされている．

(1.16)と(1.17)の定義式と(1.8)の第2式から，ただちに

$$\hat{U}^\dagger(t, \pm\infty) = \hat{U}(\pm\infty, t), \qquad \hat{U}^\dagger(\pm\infty, t) = \hat{U}(t, \pm\infty) \qquad (1.18)$$

であることが分かる．また $\varepsilon\to 0$ の極限で

$$\hat{U}(t, \pm\infty) = \hat{U}(t, t')\cdot\hat{U}(t', \pm\infty), \qquad \hat{U}(\pm\infty, t) = \hat{U}(\pm\infty, t')\cdot\hat{U}(t', t) \qquad (1.19)$$

の関係が成立する．例えば，(1.19)の第1式を証明するには次のようにしたらよい．すなわち，(1.8)と(1.6)より

$$\begin{aligned}\hat{U}(t, t')\cdot\hat{U}(t', \pm\infty) &= \hat{U}(t, t')\left[1 - \frac{i}{\hbar}\int_{\pm\infty}^{t'} \hat{U}(t', t'')\mathrm{e}^{-\varepsilon|t''|/\hbar}\hat{V}_I(t'')\mathrm{d}t''\right] \\ &= \hat{U}(t, t') - \frac{i}{\hbar}\int_{\pm\infty}^{t'} \hat{U}(t, t'')\mathrm{e}^{-\varepsilon|t''|/\hbar}\hat{V}_I(t'')\mathrm{d}t'' \\ &= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{t} \hat{U}(t, t'')\mathrm{e}^{-\varepsilon|t''|/\hbar}\hat{V}_I(t'')\mathrm{d}t'' \\ &\quad - \frac{i}{\hbar}\int_{\pm\infty}^{t'} \hat{U}(t, t'')\mathrm{e}^{-\varepsilon|t''|/\hbar}\hat{V}_I(t'')\mathrm{d}t''\end{aligned}$$

$$= 1 - \frac{i}{\hbar}\int_{\pm\infty}^{t} \hat{U}(t, t'')\mathrm{e}^{-\varepsilon|t''|/\hbar}\hat{V}_I(t'')\mathrm{d}t'' = \hat{U}(t, \pm\infty).$$

ここで1番目の等号では(1.16)を，また3番目の等号では積分範囲が有限のとき，収束因子 $\exp[-\varepsilon|t''|/\hbar]$ を追加しても，$\varepsilon\to 0$ の極限では同じであることを用いた.

(2) Møller の波動演算子と散乱状態

(1.16)の演算子を初状態 $|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$ に掛けて

$$|\Psi_i{}^{(\pm)}\rangle \equiv \hat{U}(0, \mp\infty)|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle \tag{1.20}$$

で与えられる状態ベクトルを考える．これに(1.16)を代入して，(1.2)と(1.7)を用いると

$$\begin{aligned}
|\Psi_i{}^{(\pm)}\rangle &= |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{\mp\infty}^{0}\mathrm{d}t'\,\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\mathrm{e}^{i\hat{H}t'/\hbar}\mathrm{e}^{-i\hat{H}_0t'/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{i\hat{H}_0t'/\hbar}\hat{V}\mathrm{e}^{-i\hat{H}_0t'/\hbar}|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle \\
&= |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{\mp\infty}^{0}\mathrm{d}t'\,\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\mathrm{e}^{i\hat{H}t'/\hbar}\hat{V}\mathrm{e}^{-iE_it'/\hbar}|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle \\
&= |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle - \frac{i}{\hbar}\int_{\mp\infty}^{0}\mathrm{d}t'\,\mathrm{e}^{-i(E_i-\hat{H})t'/\hbar-\varepsilon|t'|/\hbar}\hat{V}|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle \\
&= |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle + \frac{1}{E_i-\hat{H}\pm i\varepsilon}\hat{V}|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle
\end{aligned} \tag{1.21}$$

をえる.

ここで簡単なことでありながら，今後の理論の展開に大きな力を発揮する演算子公式を与えておこう．任意の交換不能な2個の演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ が，それぞれ逆演算子をもつものとして，それらを $\hat{A}^{-1}=1/\hat{A}$, $\hat{B}^{-1}=1/\hat{B}$ と書くことにする．このとき，

$$\frac{1}{\hat{A}} - \frac{1}{\hat{B}} = \frac{1}{\hat{A}}(\hat{B}-\hat{A})\frac{1}{\hat{B}} = \frac{1}{\hat{B}}(\hat{B}-\hat{A})\frac{1}{\hat{A}} \tag{1.22}$$

である．これは単に演算子の順序を考慮し，逆演算子の定義を利用して，左辺を通分したものにすぎない．ここで，$\hat{A}=E_i-\hat{H}\pm i\varepsilon$, $\hat{B}=E_i-\hat{H}_0\pm i\varepsilon$ とおくと，$\hat{B}-\hat{A}=\hat{H}-\hat{H}_0=\hat{V}$ であるから，恒等式

$$\frac{1}{E_i-\hat{H}\pm i\varepsilon} = \frac{1}{E_i-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}\left[1+\hat{V}\frac{1}{E_i-\hat{H}\pm i\varepsilon}\right] \tag{1.23}$$

が成立する．この公式を(1.21)の右辺に適用すると

$$|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle = |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle + \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}\left[1 + \hat{V}\frac{1}{E_i - \hat{H} \pm i\varepsilon}\right]\hat{V}|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$$

$$= |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle + \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}\hat{V}\left[1 + \frac{1}{E_i - \hat{H} \pm i\varepsilon}\hat{V}\right]|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$$

$$= |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle + \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle$$

となる．すなわち，(1.20)で定義された状態ベクトル $|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle$ は，方程式

$$|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle = |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle + \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle \qquad (1.24)$$

をみたしている．これを **Lippmann-Schwinger の方程式**といい，(1.21)はこの方程式の形式解である．

それでは(1.24)の方程式は何を表わしているのであろうか．いま，ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ の作用のもとにある1粒子系を考えて，そのハミルトニアンが

$$H = H_0 + V = -(\hbar^2/2m)\triangle + V(\boldsymbol{r}) \qquad (1.25)$$

であるとしよう．(1.24)の位置表示をとり，完全性の条件 $\sum_{\boldsymbol{r}'}|\boldsymbol{r}'\rangle\langle\boldsymbol{r}'|=1$ と，第2章(1.67)の関係を利用すると

$$\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle = \langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle + \sum_{\boldsymbol{r}'}\langle\boldsymbol{r}|\frac{1}{E_i - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}\hat{V}|\boldsymbol{r}'\rangle\langle\boldsymbol{r}'|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle$$

$$= \langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle + \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^3r'\frac{1}{E_i - (-\hbar^2/2m)\triangle \pm i\varepsilon}V(\boldsymbol{r})\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\langle\boldsymbol{r}'|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle$$

$$= \langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle + \frac{1}{E_i - (-\hbar^2/2m)\triangle \pm i\varepsilon}V(\boldsymbol{r})\langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle$$

となる．ここで $\boldsymbol{k}=(0,0,k)$，$E_i=\hbar^2k^2/2m$ とおき

$$\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{ikz} = \langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle, \qquad \psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle$$

と書くと，Lippmann-Schwinger の方程式は

$$\psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{ikz} + \frac{1}{\hbar^2k^2/2m - (-\hbar^2/2m)\triangle \pm i\varepsilon}V(\boldsymbol{r})\psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(\pm)}(\boldsymbol{r})$$

と表わされる．ここでデルタ関数の公式

$$\delta^3(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3k$$

を利用すると，

$$\psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{ikz} + \frac{1}{(\hbar^2/2m)(k^2+\triangle)\pm i\varepsilon}\int_{-\infty}^{\infty}\delta^3(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'$$

$$= \mathrm{e}^{ikz} + \frac{1}{(\hbar^2/2m)(k^2+\triangle)\pm i\varepsilon}\cdot\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}'\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}V(\boldsymbol{r}')$$

$$\times\psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3k'\mathrm{d}^3r'$$

$$= \mathrm{e}^{ikz} + \int_{-\infty}^{\infty}G_0{}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r}')\psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r' \tag{1.26}$$

となる．ここで $U=2mV/\hbar^2$ であり，また $\varepsilon'=2m\varepsilon/\hbar^2$ として

$$G_0{}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) \equiv \frac{1}{k^2+\triangle\pm i\varepsilon'}\cdot\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3k'$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{k^2-k'^2\pm i\varepsilon'}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3k' \tag{1.27}$$

である．(1.27)の右辺の分母の $\pm i\varepsilon'$ は，積分の特異点を避ける方法を規定している．このことを考慮して(1.27)の積分を実行すると

$$G_0{}^{(\pm)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{\mathrm{e}^{\pm ikr}}{r} \tag{1.28}$$

となる(問 56 を参照)．(1.28)の $G_0{}^{(+)}(\boldsymbol{r})$ をとり，これを(1.26)に代入すると，(1.26)の $\psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(+)}(\boldsymbol{r})$ の積分方程式は

$$\psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(+)}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{ikz} - \frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{ik|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}U(\boldsymbol{r}')\psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(+)}(\boldsymbol{r}')\,\mathrm{d}^3r'$$

となり，これはまさに第 3 章(5.19)の散乱の積分方程式である．$\psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(+)}(\boldsymbol{r})$ のとき，(1.26)の右辺の第 2 項は外向きの散乱波を与えるのに対して，$\psi_{\boldsymbol{k}}{}^{(-)}(\boldsymbol{r})$ の右辺の第 2 項は，原点 O に向かって収束する内向きの散乱波を与える．

上に説明したように，ハミルトニアンが(1.25)で与えられるとき，(1.24)は散乱の積分方程式に帰着する．ところが(1.24)の方程式は，そのような簡単な体系だけでなく，標的系が多粒子から構成されていて複雑な内部構造をもつ場合にも適用できるきわめて一般的な方程式である．その場合には，(1.24)の右辺の分母の $\hat{H}_0$ として，そのような複雑な標的系のハミルトニアンと入射粒子のハミルトニアンとの和にすればよい．そのような複雑な系であっても，形式解であるとはいえ，その解が(1.21)で与えられているということは，散乱問題の理論的分析にきわめて有力な手段となる．散乱の積分方程式を第 3 章(5.19)

の形式で表現しておいたのでは，このような芸当はちょっと思いつかないだろう．さらにまた，(1.24)の方程式は，相互作用 $\hat{V}$ がこれまで考えてきたようなポテンシャルではなく，第6章の(6.40)や(6.86)に与えた第2量子化された相互作用に対しても，また第8章で述べる量子化された場の相互作用のようなより一般的な場合にも適用することができる．このように，(1.24)の散乱の方程式の適用範囲が拡大される理由は，散乱問題を演算子 $\hat{U}(0,\mp\infty)$ による状態の転移としてとらえたことにある．

以上の結果をまとめると，演算子 $\hat{U}(0,\mp\infty)$ を，$\hat{H}_0|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle=E_i|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$ で与えられる固有状態に作用させることにより，時間の経過とともにゆっくりと相互作用 $\hat{V}$ の影響がとりいれられ，時刻 $t=0$ に達したとき，初状態 $|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$ は散乱状態 $|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle$ に成長する．(1.24)に左から，$(E_i-\hat{H}_0\pm i\varepsilon)$ を掛けると

$$
\begin{aligned}
(E_i-\hat{H}_0\pm i\varepsilon)|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle &= (E_i-\hat{H}_0\pm i\varepsilon)|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle+\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle \\
&= \pm i\varepsilon|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle+\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle
\end{aligned}
$$

となるから，

$$
(E_i-\hat{H}\pm i\varepsilon)|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle = \pm i\varepsilon|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle
$$

である．ここで $\varepsilon\to 0$ の極限をとれば*

$$
\hat{H}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle = E_i|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle. \tag{1.29}
$$

すなわち，時刻 $t=0$ での状態 $|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle$ は，初状態のエネルギー固有値 E_i と同じエネルギー固有値に属する全系のハミルトニアン $\hat{H}$ の固有状態である．これを**断熱定理**という．また，初状態から散乱状態 $|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle$ をつくりだす演算子 $\hat{U}(0,\mp\infty)$ を Møller の**波動演算子**(wave operator)という．

問56　(1.27)の右辺の積分の結果が(1.28)となることを示せ．

問57　次の推論の誤りを正せ．(1.24)において，$\hat{V}=\hat{H}-\hat{H}_0$ および(1.29)を用いると，$\varepsilon\to 0$ の極限で

$$
\begin{aligned}
|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle &= |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle+\frac{1}{E_i-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}(\hat{H}-\hat{H}_0)|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle \\
&= |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle+\frac{1}{E_i-\hat{H}_0\pm i\varepsilon}(E_i-\hat{H}_0)|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle \\
&= |\boldsymbol{\Phi}_i\rangle+|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle.
\end{aligned}
$$

---

*　すぐあとの(1.35)を用いると，$\pm i\varepsilon|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(\pm)}\rangle=\dfrac{-\varepsilon^2}{(E_i-H\pm i\varepsilon)}|\boldsymbol{\Phi}_i\rangle$ であり，これは $\hat{H}$ の固有値が E_i に一致しているときも，一致しないときも，$\varepsilon\to 0$ で消える．

したがって，$|\Phi_i\rangle=0$. これは矛盾である.

(3)　散乱状態 $|\Psi_i^{(\pm)}\rangle$ の直交規格化性

(1.26)の散乱の積分方程式の入射平面波 $\exp[ikz]$ は，単位体積当り粒子数が1個であるように規格化されている．しかし，(1.20)で与えられる散乱状態 $|\Psi_i^{(\pm)}\rangle$ の規格化条件を調べるには，一辺の長さが L の大きな立方体をとり，そのなかに粒子が1個存在するように規格化しておいたほうがよい．このとき，入射平面波は

$$\langle \boldsymbol{r}|\Phi_{\boldsymbol{k}}^{(L)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{L^3}}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{1.30}$$

と表わされ，立方体 L^3 の境界面上で第5章(2.18)の条件を要求すると

$$\langle \Phi_{\boldsymbol{k}}^{(L)}|\Phi_{\boldsymbol{k}'}^{(L)}\rangle = \frac{1}{L^3}\int_{L^3}\mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3\boldsymbol{r} = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tag{1.31}$$

となる．ここで $\boldsymbol{k}=(k_x, k_y, k_z)$ はそれぞれ $2\pi n/L$ ($n=0, \pm1, \pm2, \cdots$) である．規格化条件をこのように選んだ理由は，散乱状態 $|\Psi_i^{(\pm)}\rangle$ は(1.21)の分母の無限小のパラメーター ε に依存していて，この ε の値がいま考えている立方体の一辺の長さ L とある関係をもつからである．もともと，相互作用をスイッチ・オフするための収束因子 $\exp[-\varepsilon|t|/\hbar]$ は，入射波が平面波ではなく波束であることの代用品として導入されたものであった．そこでいま，図7.1に示されているように，ポテンシャル V が存在する領域の半径を a とし，また入射

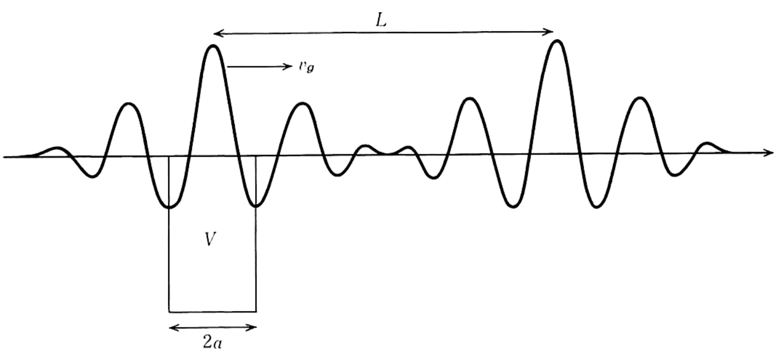


図7.1　波束の大きさと相互作用のスイッチ・オフの時間の関係

粒子の波束は大よそL^3の程度の領域にわたって分布しており，その領域にわたる波動関数の絶対値の2乗が1であるように規格化されているとする．いま，$L \gg a$であり，波束のひろがりに比較して，ポテンシャルの存在する範囲は小さいとする．時刻$t=0$において，波束はポテンシャルのある領域と重なっていて，その作用のもとにあるとしよう．この波束が群速度v_gをもって進行し，ポテンシャルの存在する領域から完全に離れてしまうまでの時間は，図7.1から明らかなように，大よそL/v_gである．したがって，相互作用$\hat{V}$がスイッチ・オフされるまでの時間$\hbar/\varepsilon$はL/v_gの程度の値でなければならない．すなわち，図7.1の波束を平面波にする極限$L\to\infty$と，スイッチ・オフのパラメーター$\varepsilon\to 0$の極限の間には

$$\varepsilon \cong \hbar v_g/L \tag{1.32}$$

の関係がある．

以上の準備のもとで，散乱状態$|\Psi_i{}^{(\pm)}\rangle$の直交規格化性を調べよう．初状態$|\Phi_i{}^{(L)}\rangle$が直交規格化条件

$$\langle\Phi_i{}^{(L)}|\Phi_j{}^{(L)}\rangle = \delta_{i,j} \tag{1.33}$$

をみたしているとき，散乱状態が確率振幅としての意味をもつためには，少なくとも$L\to\infty$の極限で

$$\langle\Psi_i{}^{(\pm)}|\Psi_j{}^{(\pm)}\rangle = \delta_{i,j} \tag{1.34}$$

でなければならない．(1.34)が成立しているか否かを調べるために，(1.21)を次のように変形しておく．

$$\begin{aligned}|\Psi_i{}^{(\pm)}\rangle &= \left[1+\frac{1}{E_i-\hat{H}\pm i\varepsilon}\hat{V}\right]|\Phi_i{}^{(L)}\rangle = \left[1+\frac{1}{E_i-\hat{H}\pm i\varepsilon}(\hat{H}-\hat{H}_0)\right]|\Phi_i{}^{(L)}\rangle \\ &= \left[1+\frac{1}{E_i-\hat{H}\pm i\varepsilon}(\hat{H}-E_i)\right]|\Phi_i{}^{(L)}\rangle = \frac{\pm i\varepsilon}{E_i-\hat{H}\pm i\varepsilon}|\Phi_i{}^{(L)}\rangle.\end{aligned} \tag{1.35}$$

(1.35)を用いると

$$\begin{aligned}\langle\Psi_i{}^{(+)}|\Psi_j{}^{(+)}\rangle &= \langle\Phi_i{}^{(L)}|\frac{-i\varepsilon}{E_i-\hat{H}-i\varepsilon}\cdot\frac{i\varepsilon}{E_j-\hat{H}+i\varepsilon}|\Phi_j{}^{(L)}\rangle \\ &= \frac{i\varepsilon}{E_j-E_i+2i\varepsilon}\langle\Phi_i{}^{(L)}|\left\{\frac{-i\varepsilon}{E_i-\hat{H}-i\varepsilon}+\frac{i\varepsilon}{E_j-\hat{H}+i\varepsilon}\right\}|\Phi_j{}^{(L)}\rangle \\ &= \frac{i\varepsilon}{E_j-E_i+2i\varepsilon}[\langle\Psi_i{}^{(+)}|\Phi_j{}^{(L)}\rangle+\langle\Phi_i{}^{(L)}|\Psi_j{}^{(+)}\rangle]\end{aligned} \tag{1.36}$$

となる．一方，(1.24)の Lippmann-Schwinger の方程式より

$$\langle \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|\boldsymbol{\Psi}_j{}^{(+)}\rangle = \langle \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|\boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}\rangle + \langle \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|\frac{1}{E_j-\hat{H}_0+i\varepsilon}\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_j{}^{(+)}\rangle$$

$$= \delta_{i,j} + \frac{1}{E_j-E_i+i\varepsilon}\langle \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_j{}^{(+)}\rangle$$

であり，同様にして

$$\langle \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}|\boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}\rangle = \delta_{i,j} + \frac{1}{E_i-E_j-i\varepsilon}\langle \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}\rangle$$

をえる．これらを(1.36)の最後の表式に代入すると

$$\langle \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}|\boldsymbol{\Psi}_j{}^{(+)}\rangle = \frac{i\varepsilon}{E_j-E_i+2i\varepsilon}\Big[2\delta_{i,j} + \frac{1}{E_j-E_i+i\varepsilon} \times \{\langle \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_j{}^{(+)}\rangle - \langle \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}\rangle\}\Big] \qquad (1.37)$$

となる．ここで

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle^* &= \langle \boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}|\hat{V}\hat{U}(0,-\infty)|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle^* \\ &= \langle \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|\hat{U}^\dagger(0,-\infty)\hat{V}|\boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}\rangle \\ &= \langle \hat{U}(0,-\infty)\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}\rangle \\ &= \langle \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}\rangle \end{aligned} \qquad (1.38)$$

であることに注意すると，(1.37)は

$$\langle \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}|\boldsymbol{\Psi}_j{}^{(+)}\rangle = \frac{2i\varepsilon}{E_j-E_i+2i\varepsilon}\Big[\delta_{i,j} + \frac{1}{2}\frac{1}{E_j-E_i+i\varepsilon} \times \{\langle \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_j{}^{(+)}\rangle - \langle \boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle^*\}\Big] \qquad (1.39)$$

となる．ここで，行列要素$\langle \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_j{}^{(+)}\rangle$において，その領域$L^3$にわたる積分が0でないのは，ポテンシャルのある領域a^3だけであるから，大よそ

$$\langle \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_j{}^{(+)}\rangle \simeq V_0 a^3/L^3 \qquad (1.40)$$

とすることができる．ここでV_0はポテンシャルの強さである．行列要素$\langle \boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle$についても同様のことがいえるので，(1.39)は

$$\langle \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}|\boldsymbol{\Psi}_j{}^{(+)}\rangle = \frac{2i\varepsilon}{E_j-E_i+2i\varepsilon}\Big[\delta_{i,j} + \frac{1}{2}\frac{1}{E_j-E_i+i\varepsilon}\cdot\frac{V_0 a^3}{L^3}\Big] \qquad (1.41)$$

と表わすことができる．$E_i \neq E_j$ のとき，$\varepsilon \to 0$，$L \to \infty$ の極限で(1.41)の右辺は 0 となり，また $E_i = E_j$ のときには，(1.32)の条件により

$$\langle \Psi_i^{(+)} | \Psi_j^{(+)} \rangle = \delta_{i,j} + \frac{1}{2i} \frac{V_0 a^3}{\varepsilon L^3} \xrightarrow[L\to\infty]{} \delta_{i,j}$$

となる．同様のことが $|\Psi_i^{(-)}\rangle$ のときにも成立し，(1.34)の散乱状態の直交規格化性が証明された．

(4)　波動演算子の性質

散乱状態 $|\Psi_i^{(\pm)}\rangle$ は，波動演算子 $\hat{U}(0, \mp\infty)$ を $\hat{H}_0$ の固有ベクトル $|\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle$ に作用させることにより形成される．すなわち

$$|\Psi_i^{(\pm)}\rangle = \hat{U}(0, \mp\infty) |\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle$$

である．ここで(1.29)を用いると

$$\begin{aligned} \hat{H} |\Psi_i^{(\pm)}\rangle &= \hat{H}\,\hat{U}(0, \mp\infty) |\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle = E_i\,\hat{U}(0, \mp\infty) |\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle \\ &= \hat{U}(0, \mp\infty) \hat{H}_0 |\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle \end{aligned}$$

となる．この式は完全系 $\{|\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle\}$ のすべての状態に対して成立する．任意の状態は $|\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle$ の重ね合わせで表わすことができる．したがって，任意の状態 $|\phi\rangle$ に対して

$$\hat{H}\,\hat{U}(0, \mp\infty) |\phi\rangle = \hat{U}(0, \mp\infty) \hat{H}_0 |\phi\rangle$$

が成立する．すなわち演算子として

$$\hat{H}\,\hat{U}(0, \mp\infty) = \hat{U}(0, \mp\infty) \hat{H}_0 \tag{1.42}$$

である．

さて，完全性の条件より

$$\sum_i |\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle\langle \boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}| = 1$$

であるから

$$\sum_i |\Psi_i^{(\pm)}\rangle\langle \boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}| = \sum_i \hat{U}(0, \mp\infty) |\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle\langle \boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}| = \hat{U}(0, \mp\infty) \tag{1.43}$$

であり，また(1.18)と(1.43)より

$$\hat{U}(\mp\infty, 0) = \hat{U}^\dagger(0, \mp\infty) = \sum_i |\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle\langle \Psi_i^{(\pm)}| \tag{1.44}$$

と表わされる．したがって，(1.43)と(1.44)および(1.34)より

$$\hat{U}^{\dagger}(0,\mp\infty)\cdot\hat{U}(0,\mp\infty)=\hat{U}(\mp\infty,0)\cdot\hat{U}(0,\mp\infty)$$
$$=\sum_{i,j}|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle\langle\Psi_i{}^{(\pm)}|\Psi_j{}^{(\pm)}\rangle\langle\boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}|=\sum_{i,j}|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle\delta_{i,j}\langle\boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}|$$
$$=\sum_i|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle\langle\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|=1 \tag{1.45}$$

である．そこで $|\Psi_i{}^{(\pm)}\rangle=\hat{U}(0,\mp\infty)|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle$ に $\hat{U}(\mp\infty,0)$ を掛けると

$$\hat{U}(\mp\infty,0)|\Psi_i{}^{(\pm)}\rangle=\hat{U}(\mp\infty,0)\hat{U}(0,\mp\infty)|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle=|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle \tag{1.46}$$

となる．すなわち，散乱状態に演算子 $\hat{U}(\mp\infty,0)$ を作用させて，時刻 $t=0$ の状態 $|\Psi_i{}^{(\pm)}\rangle$ を時刻 $t\to\mp\infty$ の状態にもどすと，元の状態 $|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle$ がえられる．

次に(1.45)と反対の順序で波動演算子の積をとると

$$\hat{U}(0,\mp\infty)\cdot\hat{U}^{\dagger}(0,\mp\infty)=\hat{U}(0,\mp\infty)\cdot\hat{U}(\mp\infty,0)$$
$$=\sum_{i,j}|\Psi_i{}^{(\pm)}\rangle\langle\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}|\boldsymbol{\Phi}_j{}^{(L)}\rangle\langle\Psi_j{}^{(\pm)}|=\sum_i|\Psi_i{}^{(\pm)}\rangle\langle\Psi_i{}^{(\pm)}|$$
$$=1-\sum_{\mathrm{B}}|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle\langle\Psi_{\mathrm{B}}| \tag{1.47}$$

となる．ここで，状態ベクトル $|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle$ は，全ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有状態の完全系 $\{\Psi_i{}^{(\pm)};\Psi_{\mathrm{B}}\}$ のうちの束縛状態であり，

$$\hat{H}|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle=E_{\mathrm{B}}|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle;\qquad E_{\mathrm{B}}<0 \tag{1.48}$$

をみたす固有ベクトルである．すなわち，$\hat{H}$ が束縛状態の存在を許すとき，(1.47)の積は1にはならない．つまり，一般に Møller の波動演算子はユニタリー演算子ではない．それでは，この束縛状態 $|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle$ に $\hat{U}(\mp\infty,0)$ を作用させたらどうなるだろうか．(1.17)の定義と(1.7)の表式から

$$\hat{U}(\pm\infty,0)|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle=\left[1+\frac{i}{\hbar}\int_{\pm\infty}^{0}\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\hat{V}(t')\hat{U}(t',0)\mathrm{d}t'\right]|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle$$
$$=|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle+\frac{i}{\hbar}\int_{\pm\infty}^{0}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\mathrm{e}^{i\hat{H}_0t'/\hbar}\hat{V}\mathrm{e}^{-i\hat{H}_0t'/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{i\hat{H}_0t'/\hbar}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t'/\hbar}|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle$$
$$=|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle+\frac{i}{\hbar}\int_{\pm\infty}^{0}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\mathrm{e}^{i(\hat{H}_0-E_{\mathrm{B}})t'/\hbar}\hat{V}|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle$$
$$=|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle+\frac{1}{\hat{H}_0-E_{\mathrm{B}}\mp i\varepsilon}\hat{V}|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle$$
$$=|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle+\frac{1}{\hat{H}_0-E_{\mathrm{B}}\mp i\varepsilon}(E_{\mathrm{B}}-\hat{H}_0)|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle=|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle-|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle=0 \tag{1.49}$$

がえられる．ここで最後の等号では，$\hat{H}_0$ の固有値 E_i の値は正であり，一方 $E_B<0$ であるから，演算子 $[\hat{H}_0-E_B\mp i\varepsilon]^{-1}$ の分母には特異点がなく，したがって $\varepsilon=0$ としてよいことを利用している．すなわち，全ハミルトニアンの束縛状態 $|\Psi_B\rangle$ に $\hat{U}(\mp\infty,0)$ を掛けて，時刻 $t\to\mp\infty$ にもどすと，(1.46)のときと違って，その状態は0になってしまう．また(1.49)から

$$\langle\Psi_B|\Psi_i^{(\pm)}\rangle=\langle\Psi_B|\hat{U}(0,\mp\infty)|\Phi_i^{(L)}\rangle$$
$$=\langle\hat{U}(\mp\infty,0)\Psi_B|\Phi_i^{(L)}\rangle=0 \qquad (1.50)$$

となる．すなわち，散乱状態 $|\Psi_i^{(\pm)}\rangle$ は束縛状態 $|\Psi_B\rangle$ と直交している．

これまで調べてきた波動演算子の性質をまとめたのが図7.2である．図7.2の上部の横線といくつかの点は，時刻 $t=0$ における全ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有値のスペクトルと，それに対応する固有状態を表わすものとする．また下部の横線は，時刻 $t=\mp\infty$ におけるハミルトニアン $\hat{H}_0$ の正の固有値のスペクトルと，それに属する固有状態を示すものである．このとき，時刻 $t=0$ における散乱状態と，初状態(あるいは終状態)とは，波動演算子によって結ばれ，断熱定理によってエネルギー固有値は同じ値に保たれる．一方，全ハミルトニアン $\hat{H}$ の束縛状態 $|\Psi_B\rangle$ に波動演算子を作用させると0になってしまう．つまり，束縛状態は，波動演算子を用いても，$\hat{H}_0$ の固有状態からつくり出すことはできない．

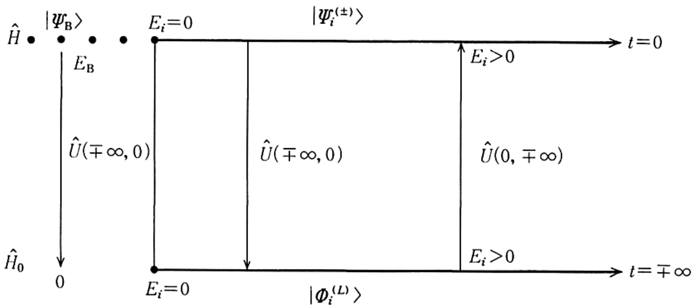


図7.2　波動演算子の性質

(5)　*S*-行列

散乱現象を状態間の転移としてとらえて，その転移確率を求めるには，(1.14)の S-行列を求めなければならない．それにはまず，**S-演算子** $\hat{U}(+\infty,-\infty)$

を定義しておく必要がある．そこで(1.17)の定義を利用して，S-演算子を

$$\hat{U}(\pm\infty,\mp\infty)\equiv 1-\frac{i}{\hbar}\int_{\mp\infty}^{\pm\infty}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\hat{V}_I(t')\hat{U}(t',\mp\infty) \quad (1.51)$$

で定義することができる．ここで右辺の $\hat{U}(t',\mp\infty)$ は(1.16)ですでに定義されているものである．あるいはまた，(1.16)を利用して，S-演算子を

$$\hat{U}(\pm\infty,\mp\infty)\equiv 1-\frac{i}{\hbar}\int_{\mp\infty}^{\pm\infty}\mathrm{d}t'\hat{U}(\pm\infty,t')\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\hat{V}_I(t') \quad (1.52)$$

で定義してもよい．さらにそれを

$$\hat{U}(\pm\infty,\mp\infty)\equiv\hat{U}(\pm\infty,0)\cdot\hat{U}(0,\mp\infty) \quad (1.53)$$

で定義することもできる．上にあげた3個の定義が同等でなければ理論の無矛盾性が疑われることになるが，実はこれらの定義が一致することが証明できるのである(問58を参照)．なお，(1.51),(1.52)および(1.18)から

$$\hat{U}(\pm\infty,\mp\infty)=\hat{U}^{\dagger}(\mp\infty,\pm\infty). \quad (1.54)$$

上に与えたS-演算子の定義にもとづいて，S-行列を Schrödinger 表示の演算子で表わそう．初状態を $|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle$，終状態を $|\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}\rangle$ とすると，S-行列は，(1.51)と(1.19)および(1.7)を用いて，次のように計算される．

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\hat{S}|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle &= \langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\hat{U}(+\infty,-\infty)|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle \\ &= \langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle-\frac{i}{\hbar}\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\hat{V}_I(t')\hat{U}(t',-\infty)|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle \\ &= \delta_{f,i}-\frac{i}{\hbar}\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\hat{V}_I(t')\hat{U}(t',0)|\hat{U}(0,-\infty)\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle \\ &= \delta_{f,i}-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{-\varepsilon|t'|/\hbar}\mathrm{e}^{+iE_ft'/\hbar}\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\hat{V}\mathrm{e}^{-i\hat{H}t'/\hbar}|\Psi_i{}^{(+)}\rangle.\end{aligned}$$

ここで $\varepsilon\to0$ ($L\to\infty$) の極限をとると，(1.29)により

$$\begin{aligned}S_{f,i} &= \delta_{f,i}-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t'\mathrm{e}^{+i(E_f-E_i)t'/\hbar}\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\hat{V}|\Psi_i{}^{(+)}\rangle \\ &= \delta_{f,i}-2\pi i\delta(E_f-E_i)\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\hat{V}|\Psi_i{}^{(+)}\rangle \end{aligned} \quad (1.55)$$

となる．この表式は，散乱現象を状態間の転移としてとらえる理論において，もっとも重要な役割を果す公式である．(1.55)から散乱断面積の表式を導くまえに，S-演算子のもつ一般的性質について調べておこう．

(1.53)の定義により，S-行列は散乱状態 $|\Psi_i{}^{(\pm)}\rangle$ を用いて

$$\langle \Phi_a{}^{(L)}|\hat{S}|\Phi_b{}^{(L)}\rangle = \langle \Phi_a{}^{(L)}|\hat{U}(+\infty,0)\cdot\hat{U}(0,-\infty)|\Phi_b{}^{(L)}\rangle$$
$$= \langle \hat{U}^{\dagger}(+\infty,0)\Phi_a{}^{(L)}|\hat{U}(0,-\infty)\Phi_b{}^{(L)}\rangle = \langle \hat{U}(0,+\infty)\Phi_a{}^{(L)}|\hat{U}(0,-\infty)\Phi_b{}^{(L)}\rangle$$
$$= \langle \Psi_a{}^{(-)}|\Psi_b{}^{(+)}\rangle \tag{1.56}$$

と表わすことができる．同様にして

$$\langle \Phi_a{}^{(L)}|\hat{S}^{\dagger}|\Phi_b{}^{(L)}\rangle = \langle \Phi_a{}^{(L)}|\hat{U}^{\dagger}(+\infty,-\infty)|\Phi_b{}^{(L)}\rangle$$
$$= \langle \Phi_a{}^{(L)}|\hat{U}(-\infty,+\infty)|\Phi_b{}^{(L)}\rangle = \langle \Phi_a{}^{(L)}|\hat{U}(-\infty,0)\cdot\hat{U}(0,+\infty)|\Phi_b{}^{(L)}\rangle$$
$$= \langle \hat{U}(0,-\infty)\Phi_a{}^{(L)}|\hat{U}(0,+\infty)\Phi_b{}^{(L)}\rangle = \langle \Psi_a{}^{(+)}|\Psi_b{}^{(-)}\rangle \tag{1.57}$$

である．したがって

$$\sum_c \langle \Phi_a{}^{(L)}|\hat{S}^{\dagger}|\Phi_c{}^{(L)}\rangle\langle \Phi_c{}^{(L)}|\hat{S}|\Phi_b{}^{(L)}\rangle = \sum_c \langle \Psi_a{}^{(+)}|\Psi_c{}^{(-)}\rangle\langle \Psi_c{}^{(-)}|\Psi_b{}^{(+)}\rangle$$
$$= \langle \Psi_a{}^{(+)}|\left\{1-\sum_{\mathrm{B}}|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle\langle\Psi_{\mathrm{B}}|\right\}|\Psi_b{}^{(+)}\rangle = \langle \Psi_a{}^{(+)}|\Psi_b{}^{(+)}\rangle = \delta_{a,b}$$

となる．ここで全ハミルトニアン $\hat{H}$ の固有状態の完全性

$$\sum_c |\Psi_c{}^{(-)}\rangle\langle\Psi_c{}^{(-)}| + \sum_{\mathrm{B}}|\Psi_{\mathrm{B}}\rangle\langle\Psi_{\mathrm{B}}| = 1$$

と，(1.50)の直交性を用いた．同様にして

$$\sum_c \langle \Phi_a{}^{(L)}|\hat{S}|\Phi_c{}^{(L)}\rangle\langle \Phi_c{}^{(L)}|\hat{S}^{\dagger}|\Phi_b{}^{(L)}\rangle = \delta_{a,b}$$

も成立する．したがって

$$\hat{S}^{\dagger}\cdot\hat{S} = \hat{S}\cdot\hat{S}^{\dagger} = 1 \tag{1.58}$$

である．すなわち，S-演算子は波動演算子 $\hat{U}(0,\mp\infty)$ と異なり，全ハミルトニアン $\hat{H}$ が束縛状態の存在を許すか否かに関係なく，ユニタリー演算子である．このことは，散乱の前後で全確率が保存されることを意味している．

さて，(1.42)に左から $\hat{U}(+\infty,0)$ を掛けると

$$\hat{U}(+\infty,0)\hat{H}\hat{U}(0,-\infty) = \hat{U}(+\infty,0)\hat{U}(0,-\infty)\hat{H}_0 = \hat{S}\hat{H}_0 \tag{1.59}$$

である．一方，(1.42)のエルミート共役をとると，$\hat{U}(+\infty,0)\hat{H}=\hat{H}_0\hat{U}(+\infty,0)$ となる．これに右から $\hat{U}(0,-\infty)$ を掛けると

$$\hat{U}(+\infty,0)\hat{H}\hat{U}(0,-\infty) = \hat{H}_0\hat{U}(+\infty,0)\hat{U}(0,-\infty) = \hat{H}_0\hat{S} \tag{1.60}$$

である．(1.59)と(1.60)を比較すると

$$[\hat{S},\hat{H}_0]=0 \tag{1.61}$$

をえる．この行列要素をとると

$$\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|[\hat{S},\hat{H}_0]|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle=(E_i-E_f)\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\hat{S}|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle=0 \tag{1.62}$$

である．ここで，デルタ関数の性質 $x\delta(x)=0$ に注意すると，(1.62)は行列 $S_{f,i}$ が $\delta(E_f-E_i)$ に比例することを示している．すなわち，散乱の前後において，ハミルトニアン $\hat{H}_0$ のエネルギーの値が保存される．全系のハミルトニアン $\hat{H}$ のエネルギーの値が保存されるというのなら，それは当然と考えられるが，$\hat{H}$ の一部の $\hat{H}_0$ のエネルギーの値が保存されるというのは決して自明のことではない．事実，第5章§3の Einstein 係数の計算過程で，(3.14)の表式にはエネルギーが保存しない項が現われていた．そこでは，そのような項からの寄与を小さいとして無視したのであった．このような不都合な項が現われる原因は，相互作用が特定の時刻 $t=0$ から急激にはいるとしたことにある．それに対していまの場合にはそのような項が現われず，$\hat{H}_0$ のエネルギーの値が正確に保存されるのは，相互作用が $t=-\infty$ から準静的にいれられているからである．

問 58　(1.51)，(1.52)および(1.53)の S-演算子の3個の定義が一致することを証明せよ．

問 59　次の推論の誤りを正せ．(1.29)とデルタ関数の性質 $x\delta(x)=0$ を利用すると，

$$\begin{aligned}S_{f,i}&=\delta_{f,i}-2\pi i\delta(E_i-E_f)\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle\\&=\delta_{f,i}-2\pi i\delta(E_f-E_i)\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|(\hat{H}-\hat{H}_0)|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle\\&=\delta_{f,i}-2\pi i\delta(E_f-E_i)\cdot(E_i-E_f)\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle=\delta_{f,i}.\end{aligned}$$

したがって，いかなる相互作用によっても散乱はおきない．

§2　転移確率と散乱断面積

前節でえられた(1.55)の表式は，時刻 $t=-\infty$ に $\hat{H}_0$ の固有状態 $|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle$ として設定された体系が，時刻 $t=+\infty$ において，$\hat{H}_0$ の固有状態 $|\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}\rangle$ に転移する確率振幅を与える．ここで，$f\neq i$ とすると，状態 $|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle$ から状態 $|\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}\rangle$ への転移確率は

$$W_{f,i}=|S_{f,i}|^2=\{2\pi\delta(E_f-E_i)\}^2\cdot|\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle|^2$$

で与えられる．ここで $\tau\equiv(t\to+\infty)-(t\to-\infty)$ とおくと，

$$[\delta(E_f-E_i)]^2=\delta(E_f-E_i)\cdot\frac{1}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{i(E_f-E_i)t/\hbar}=\delta(E_f-E_i)\cdot\frac{\tau}{2\pi\hbar}$$

である．$W_{f,i}$ は無限大の時間 τ の間の転移確率であるから，単位時間当りの転移確率は

$$w_{f,i}=W_{f,i}/\tau=\frac{2\pi}{\hbar}\delta(E_f-E_i)|\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle|^2 \qquad (2.1)$$

で表わされる．これは，第5章(2.17)の摂動の第1近似での Fermi の黄金律を一般化したものであり，近似によらない厳密な表式である．

ここで数式を簡潔にするために

$$\hat{G}_0(E_i\pm i\varepsilon)=1/(E_i-\hat{H}_0\pm i\varepsilon) \qquad (2.2)$$

と表わすと，(1.24)の Lippmann-Schwinger の方程式は

$$|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle=|\boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)}\rangle+\hat{G}_0(E_i+i\varepsilon)\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle \qquad (2.3)$$

となる．(2.3)で $|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle$ を右辺の第1項で近似するのが，第3章§5の Born 近似にほかならない．また，その近似を(2.1)に適用すれば，第5章(2.17)に一致する．こうして，この章のはじめに提出した異なる二つの方法によってえられた結果が一致する理由が理解される．(2.1)から散乱断面積を求める手続きは，第5章(2.33)を導くときと全く同じである．すなわち，1粒子のポテンシャル $\hat{V}$ による散乱の場合には，散乱の微分断面積は

$$\sigma(\theta)=\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\cdot\frac{k_f}{k_i}\cdot L^6|\langle\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}|\hat{V}|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle|^2$$
$$=\left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\frac{k_f}{k_i}|\langle\phi_f|\hat{V}|\phi_i{}^{(+)}\rangle|^2 \qquad (2.4)$$

で与えられる．ここで，規格化条件を変更して

$$|\boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)}\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{L^3}}|\phi_f\rangle,\qquad\langle\boldsymbol{r}|\phi_f\rangle=\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{r}},$$
$$|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle\equiv\frac{1}{\sqrt{L^3}}|\phi_i{}^{(+)}\rangle \qquad (2.5)$$

とおいている．

(2.1)の単位時間当りの転移確率または(2.4)の散乱断面積を求めるには，(2.3)の Lippmann-Schwinger の方程式を解いて，えられた解 $|\boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)}\rangle$ を

(2.1)または(2.4)に代入すればよい．ここで任意の複素数 z を用いて

$$\hat{G}(z) \equiv 1/(z-\hat{H}), \qquad \hat{G}_0(z) \equiv 1/(z-\hat{H}_0) \tag{2.6}$$

と定義すると，(1.23)の公式を一般化して

$$\hat{G}(z) = \hat{G}_0(z) + \hat{G}_0(z)\hat{V}\hat{G}(z) \tag{2.7}$$

と書くことができる．一方，(1.21)と(2.6)より

$$\begin{aligned} \langle \boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)} | \hat{V} | \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)} \rangle &= \langle \boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)} | \hat{V}(1+\hat{G}(E_i+i\varepsilon)\hat{V}) | \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)} \rangle \\ &= \langle \boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)} | \hat{T}(E_i+i\varepsilon) | \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)} \rangle \end{aligned} \tag{2.8}$$

をえる．ここで

$$\hat{T}(E_i+i\varepsilon) \equiv \hat{V} + \hat{V}\hat{G}(E_i+i\varepsilon)\hat{V} \tag{2.9}$$

である．そこで，(2.7)の $\hat{G}(z)$ に関する積分方程式を複素平面 z 上の解きやすい領域で解き，その結果を解析的に延長して，$z=E_i+i\varepsilon$ での解 $\hat{G}(E_i+i\varepsilon)$ を求める．これを(2.9)に代入して $\hat{T}(E_i+i\varepsilon)$ を求めて，それを(2.8)に代入する．このように，$\hat{G}(E_i+i\varepsilon)$ を複素平面 z 上に拡張したものを**エネルギー・オフ・シェル**(energy-off-shell)の $\hat{G}$ といい，このような量は，散乱振幅のもつ一般的性質を調べるのに役立つ．なお，$\hat{T}(z)=\hat{V}+\hat{V}\hat{G}(z)\hat{V}$ で $\hat{T}(z)$ を定義すれば，(2.7)より，$\hat{T}(z)$ の積分方程式

$$\begin{aligned} \hat{T}(z) &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}(z)\hat{V} = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)[1+\hat{V}\hat{G}(z)]\hat{V} \\ &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(z)\hat{T}(z) \end{aligned} \tag{2.10}$$

がえられる．$\hat{G}(z)$ のかわりに，(2.10)を解いて $\hat{T}(z)$ を用いてもよい．

最後に，S 演算子のユニタリー性(1.58)からえられる一つの定理を証明しておこう．(1.58)より

$$\sum_f \langle \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)} | \hat{S}^\dagger | \boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)} \rangle \langle \boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)} | \hat{S} | \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)} \rangle = 1 \tag{2.11}$$

である．これに(1.55)を代入して，(1.38)の性質を利用すると

$$\sum_f \Big[\delta_{f,i} + 2\pi i \,\delta_{f,i}\,\delta(E_f-E_i) \{ \langle \boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)} | \hat{V} | \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)} \rangle^* - \langle \boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)} | \hat{V} | \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)} \rangle \} \\ + (2\pi)^2 \delta^2(E_f-E_i) | \langle \boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)} | \hat{V} | \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)} \rangle |^2 \Big] = 1$$

となる．これより

$$4\pi\, \mathscr{I}_m \langle \boldsymbol{\Phi}_i{}^{(L)} | \hat{V} | \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)} \rangle + (2\pi)^2 \sum_f \delta(E_f-E_i) | \langle \boldsymbol{\Phi}_f{}^{(L)} | \hat{V} | \boldsymbol{\Psi}_i{}^{(+)} \rangle |^2 = 0.$$

ここで右辺の第2項に(2.1)を代入すると

$$-\frac{2}{\hbar}\mathscr{I}_m\langle\Phi_i{}^{(L)}|\hat{V}|\Psi_i{}^{(+)}\rangle=\sum_f w_{f,i} \tag{2.12}$$

をえる．これは第3章(5.42)の**光学定理**を一般化したものである．

問60　(2.12)の関係を，1粒子系のポテンシャル散乱に適用したとき，それが第3章(5.42)の光学定理と一致することを示せ．

§3　同種粒子の散乱

(1)　実験室系と質量中心系

同種粒子の散乱の問題を扱う準備として，ここで実験室系と質量中心系について説明しておこう．最近の高エネルギー物理学における実験のように，加速された2個の素粒子を正面衝突させる場合は別として，通常の散乱の実験では静止している標的に向けて粒子を投射する．このように，衝突前の標的粒子が静止している座標系を**実験室系**という．一方，理論的立場からは，第3章§1のはじめに述べたように，入射粒子と標的粒子の質量中心(重心)の運動を分離して，それらの相対運動を考えたほうが問題が簡単になる．そこで，質量中心に対して静止している座標系をとり，それを**質量中心系**という．いま，入射粒子の質量を m_1，標的粒子の質量を m_2，実験室系で測った散乱角を θ_L，質量中心系からみた散乱角を θ とすると，これらの散乱角の間には

$$\cos\theta_L=\frac{m_1+m_2\cos\theta}{\sqrt{m_1{}^2+m_2{}^2+2m_1m_2\cos\theta}} \tag{3.1}$$

の関係が成立する(問61)．したがって，標的粒子の質量 m_2 が入射粒子の質量 m_1 に比べて十分に大きいとき，すなわち $m_2\gg m_1$ のときは，$\theta_L\cong\theta$ である．逆に $m_1\gg m_2$ のときには，$\theta_L\cong 0$ となる．つまりこのとき，入射粒子の方向は変化しない．また $m_1=m_2$ のときには

$$\cos\theta_L=\sqrt{(1+\cos\theta)/2}=\cos(\theta/2) \tag{3.2}$$

となるから，$\theta_L=\theta/2$ である．すなわち，実験室系での散乱角 θ_L は，質量中心系での散乱角 θ の半分である．したがって，θ の0から π までの変化に伴って，θ_L のとる値は0から $\pi/2$ の範囲に限られる．つまり，実験室系での散乱角の最大値は90°である．

質量中心系において，その立体角 $d\Omega=\sin\theta\, d\theta\cdot d\varphi$ の領域内に粒子が散乱される断面積は $\sigma(\theta)d\Omega$ で与えられ，一方，同じ実験事実を実験室系からみたとき，その粒子が立体角 $d\Omega_L=\sin\theta_L\, d\theta_L\cdot d\varphi_L$ のなかに散乱されてくる断面積は $\sigma(\theta_L)d\Omega_L$ である．上の立体角 $d\Omega$ と $d\Omega_L$ とは，同一の空間領域を，それぞれの座標系の量で表現したものである．したがって，その同じ領域内に散乱されてくる粒子数は，どちらの座標系から観測しても同じ数である．すなわち，$\sigma(\theta_L)d\Omega_L=\sigma(\theta)d\Omega$ である．粒子が入射する方向を z 軸に選べば，その軸のまわりの角に関しては $d\varphi_L=d\varphi$ である．そこで(3.1)を微分することにより

$$\frac{d\Omega_L}{d\Omega}=\frac{\sin\theta_L\cdot d\theta_L}{\sin\theta\cdot d\theta}=\frac{d\cos\theta_L}{d\cos\theta}=\frac{m_2{}^2(m_2+m_1\cos\theta)}{(m_1{}^2+m_2{}^2+2m_1m_2\cos\theta)^{3/2}}$$

をえる．これより，微分断面積の間に

$$\sigma(\theta_L)=\sigma(\theta)\frac{d\Omega}{d\Omega_L}=\sigma(\theta)\cdot\frac{(1+2\tau\cos\theta+\tau^2)^{3/2}}{1+\tau\cos\theta} \tag{3.3}$$

の関係があることが分かる．ここで $\tau=m_1/m_2$ である．

問 61　実験室系での散乱角 θ_L と，質量中心系での散乱角 θ の間に(3.1)の関係があることを証明せよ．

(2)　同種粒子の散乱

質量 m の同種粒子のポテンシャル散乱を考えよう．このときに，(1)で説明した質量中心系を採用するのが合理的である．2 粒子の弾性散乱の微分断面積は(2.4)で与えられる．ただしこのときは $k_i=k_f$ である．しかしいまの場合には，初状態 $|\phi_i\rangle$ と終状態 $|\phi_f\rangle$ としては，対称化(または反対称化)された状態 $|\phi_i{}^{(S)}\rangle$ および $|\phi_f{}^{(S)}\rangle$ を用いなければならない．すなわち，

$$\sigma(\theta)=\left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)|\langle\phi_f{}^{(S)}|\hat{T}(E_i+i\varepsilon)|\phi_i{}^{(S)}\rangle|^2. \tag{3.4}$$

ここで $\mu=m/2$ は 2 粒子の換算質量である．また，位置表示をとると，対称化(反対称化)された状態関数は

$$\phi_i{}^{(S)}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\pm\phi_{\boldsymbol{k}}(-\boldsymbol{r})],\qquad \phi_f{}^{(S)}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r})\pm\phi_{\boldsymbol{k}'}(-\boldsymbol{r})] \tag{3.5}$$

で与えられる．なおこのとき，(2.5)の

$$\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}, \qquad \phi_{\boldsymbol{k}'}(\boldsymbol{r}) = \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}$$

を用いている．ここで $\boldsymbol{r}$ は2粒子間の相対座標，$\boldsymbol{k}$ と $\boldsymbol{k}'$ はそれぞれ，初状態と終状態の相対運動の波数ベクトルである．2個の粒子が同種粒子のとき，相対運動のハミルトニアンにおいて

$$H(-\boldsymbol{p}, -\boldsymbol{r}) = H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r}), \qquad V(-\boldsymbol{r}) = V(\boldsymbol{r})$$

が成立し，これらは粒子のいれかえに対して不変である．したがって，(3.4)の $\hat{T}(E_i+i\varepsilon)$ の位置表示を $T_{\boldsymbol{r}}(E_i)$ と書くと

$$T_{\boldsymbol{r}}(E_i) = V(\boldsymbol{r})+V(\boldsymbol{r})\frac{1}{E_i-H+i\varepsilon}V(\boldsymbol{r})$$

もまた粒子のいれかえに対して不変で

$$T_{-\boldsymbol{r}}(E_i) = T_{\boldsymbol{r}}(E_i) \tag{3.6}$$

である．そこで

$$\begin{aligned}&\langle\phi_f{}^{(\mathrm{S})}|\hat{T}(E_i+i\varepsilon)|\phi_i{}^{(\mathrm{S})}\rangle\\&=\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^3r[\phi_{\boldsymbol{k}'}{}^*(\boldsymbol{r})T_{\boldsymbol{r}}(E_i)\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})+\phi_{\boldsymbol{k}'}{}^*(-\boldsymbol{r})T_{\boldsymbol{r}}(E_i)\phi_{\boldsymbol{k}}(-\boldsymbol{r})\\&\qquad\pm\phi_{\boldsymbol{k}'}{}^*(\boldsymbol{r})T_{\boldsymbol{r}}(E_i)\phi_{\boldsymbol{k}}(-\boldsymbol{r})\pm\phi_{\boldsymbol{k}'}{}^*(-\boldsymbol{r})T_{\boldsymbol{r}}(E_i)\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})]\end{aligned}$$

の右辺の第2項と第3項の積分変数を $\boldsymbol{r}$ から $-\boldsymbol{r}$ に変えて，(3.6)を用いると

$$\begin{aligned}&\langle\phi_f{}^{(\mathrm{S})}|\hat{T}(E_i+i\varepsilon)|\phi_i{}^{(\mathrm{S})}\rangle\\&=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^3r[\phi_{\boldsymbol{k}'}{}^*(\boldsymbol{r})T_{\boldsymbol{r}}(E_i)\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\pm\phi_{\boldsymbol{k}'}{}^*(-\boldsymbol{r})T_{\boldsymbol{r}}(E_i)\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})]\end{aligned} \tag{3.7}$$

がえられる．したがって，(3.4)の微分断面積は

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2\left|\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^3r\,\phi_{\boldsymbol{k}'}{}^*(\boldsymbol{r})T_{\boldsymbol{r}}(E_i)\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\pm\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}^3r\,\phi_{\boldsymbol{k}'}{}^*(-\boldsymbol{r})T_{\boldsymbol{r}}(E_i)\phi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\right|^2 \tag{3.8}$$

と表わされる．この場合，全断面積 σ^{tot} は

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = \frac{1}{2}\int_{\text{全立体角}}\sigma(\theta)\mathrm{d}\Omega = \int_0^{\pi/2}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\,\sigma(\theta) \tag{3.9}$$

で与えられる．このとき，散乱角 θ に関する積分範囲は，区別できる粒子のときの半分，すなわち，$\pi/2\geqq\theta\geqq0$ である．なぜなら，図7.3に示したように，

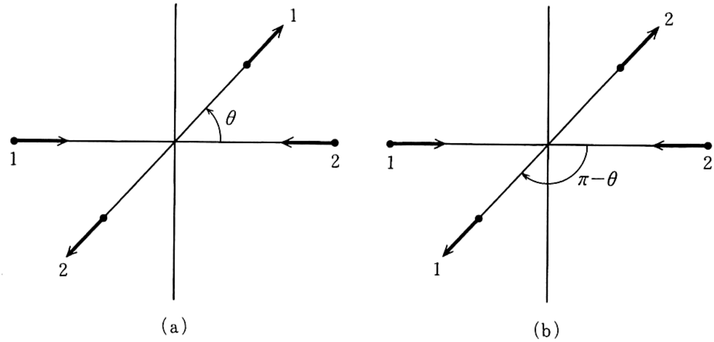


図 7.3 散乱角 θ の積分の範囲

区別できる粒子の場合には，図の(a)と(b)とは別の散乱過程として観測されるが，同種粒子の場合には，これらは同一の過程として観測される．したがって，散乱角 θ に関して $\pi \geqq \theta \geqq 0$ の範囲にわたって積分すると，散乱された粒子数を 2 重に数えることになるからである．

ここで(3.8)の微分断面積を Born 近似で計算しよう．このとき，$T_r(E_i) \cong V(r)$ で近似する．すると，(3.8)は

$$\sigma^{(\mathrm{B})}(\theta) = \left(\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-i(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}} V(r) \mathrm{d}^3 r \pm \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}} V(r) \mathrm{d}^3 r \right|^2 \tag{3.10}$$

となる．ここで $\boldsymbol{K}=\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{k}$，$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{k}$ とおいて，$|\boldsymbol{k}'|=|\boldsymbol{k}|=k$ に注意し，$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}'=k^2\cos\theta$ とする．ここで θ は散乱角である．このとき $K=2k\sin(\theta/2)$，$L=2k\cos(\theta/2)$ となる．(3.10)を K, L および θ で表わして，(3.10)の右辺の角積分を行うと

$$\sigma^{(\mathrm{B})}(\theta) = \frac{4\mu^2}{\hbar^4}\left[K^{-1}\int_0^{\infty} V(r) r \sin Kr \mathrm{d}r \pm L^{-1}\int_0^{\infty} V(r) r \sin Lr \mathrm{d}r\right]^2 \tag{3.11}$$

をえる．ここで残った積分を実行するために，粒子間のポテンシャルとして，Yukawa 型のポテンシャル

$$V(r) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\mathrm{e}^{-\kappa r}}{r} \tag{3.12}$$

をとると，

$$\int_0^\infty V(r)r\sin Kr\mathrm{d}r = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{K}{K^2+\kappa^2} \xrightarrow[\kappa\to 0]{} \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 K} \tag{3.13}$$

となる．すなわち，(3.12)で $\kappa\to 0$ にしたときには，2個の同種荷電粒子の Coulomb 散乱を与える．この場合，(3.11)は

$$\begin{aligned}\sigma^{(\mathrm{B})}(\theta) &= \frac{4\mu^2}{\hbar^4}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\left[\frac{1}{K^2}\pm\frac{1}{L^2}\right]^2 \\ &= \frac{1}{4\mu^2v^4}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}+\frac{1}{\cos^4(\theta/2)}\pm\frac{2}{\sin^2(\theta/2)\cdot\cos^2(\theta/2)}\right]\end{aligned} \tag{3.14}$$

となる．ここで $v=\hbar k/\mu$ は，2粒子間の相対速度である．(3.14)の右辺の第1項は，通常の Rutherford 散乱の断面積であり，第2項は状態関数の対称化(反対称化)によって現われた項で，第3項は第1項と第2項の干渉項である．第2項は区別できない古典的粒子の場合にも現われる項であるが，第3項は量子力学特有の項である．

2個の粒子が α 粒子(電荷を e とする)のようなスピン0の Bose 粒子のときには，(3.14)の右辺の第3項で正号をとる．このとき微分断面積は

$$\sigma^{(\mathrm{B})}(\theta) = \frac{1}{4\mu^2v^4}\cdot\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}+\frac{1}{\cos^4(\theta/2)}+\frac{2}{\sin^2(\theta/2)\cdot\cos^2(\theta/2)}\right] \tag{3.15}$$

で与えられる．

次にスピン1/2の Fermi 粒子の散乱，例えば電子-電子の散乱の場合には，2個の電子のスピン関数が対称で3重状態のときには，状態関数の空間部分は反対称であり，スピン関数が反対称で1重状態のとき，空間部分は対称関数でなければならない．このとき，系の初状態がどちらの状態にあるかは原理的には測定が可能であり，その測定がなされていないときには，その状態は混合状態で表わされる．したがって，微分断面積は状態数に関して等しい重みをつけた平均値

$$\sigma(\theta) = (3/4)\sigma^{(\mathrm{t})}(\theta)+(1/4)\sigma^{(\mathrm{s})}(\theta) \tag{3.16}$$

で与えられる．ここで $\sigma^{(\mathrm{t})}(\theta)$ は3重状態，$\sigma^{(\mathrm{s})}(\theta)$ は1重状態に対する微分断面積である．なお，$\sigma^{(\mathrm{t})}(\theta)$ に対しては(3.14)の負号を，$\sigma^{(\mathrm{s})}(\theta)$ に対しては正

号をとる．すると，

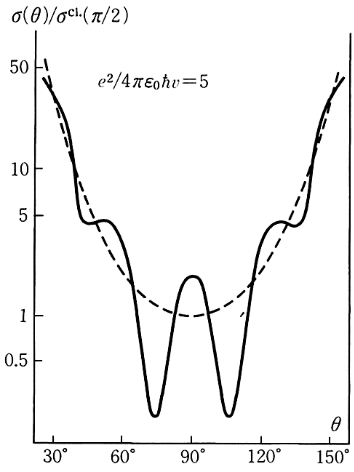
$$\sigma^{(B)}(\theta) = \frac{1}{4\mu^2 v^4}\cdot\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}+\frac{1}{\cos^4(\theta/2)}-\frac{1}{\sin^2(\theta/2)\cdot\cos^2(\theta/2)}\right]. \tag{3.17}$$

(3.15)と(3.17)の微分断面積は Born 近似にもとづくものであり，Coulomb ポテンシャルを厳密に扱うと，これらはそれぞれ

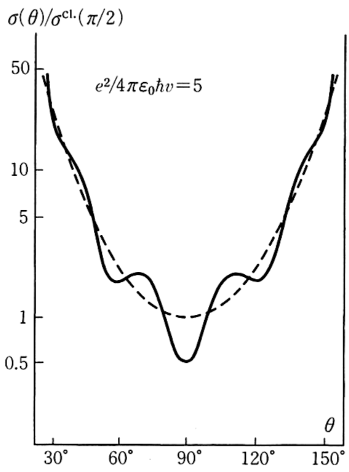
$$\sigma(\theta) = \frac{(e^2/4\pi\varepsilon_0)^2}{4\mu^2 v^4}\left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}+\frac{1}{\cos^4(\theta/2)}+\frac{2\cos[(e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar v)\log\{\tan^2(\theta/2)\}]}{\sin^2(\theta/2)\cdot\cos^2(\theta/2)}\right], \tag{3.18}$$

$$\sigma(\theta) = \frac{(e^2/4\pi\varepsilon_0)^2}{4\mu^2 v^4}\left[\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}+\frac{1}{\cos^4(\theta/2)}-\frac{\cos[(e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar v)\log\{\tan^2(\theta/2)\}]}{\sin^2(\theta/2)\cdot\cos^2(\theta/2)}\right] \tag{3.19}$$

で与えられる．(3.18)と(3.19)の第3項は，散乱角 θ の変化に伴って振動するが，その振動は無次元の定数$(e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar v)$の増大とともに激しくなる．図7.4は，$(e^2/4\pi\varepsilon_0\hbar v)=5$ としたときの微分断面積の角分布を示したものである．図



(a) Bose 粒子
実線は(3.18)，点線は $\sigma^{\mathrm{cl.}}(\theta)$



(b) Fermi 粒子
実線は(3.19)，点線は $\sigma^{\mathrm{cl.}}(\theta)$

図7.4 同種の荷電粒子の散乱の微分断面積の角分布

の $\sigma^{\mathrm{cl.}}(\theta)$ は，(3.18)と(3.19)の第3項を除いた古典的な微分断面積である．図7.4の(a)と(b)を比較すると分かるように，Bose粒子のときには $\theta=\pi/2$ に極大値があるのに対して，Fermi粒子のときには $\theta=\pi/2$ に極小値がある．

§4　多粒子系による散乱

多数の原子から構成されている結晶や，多数の核子からなる原子核などに，例えば中性子を衝突させて，その散乱断面積を測定することによって，結晶の原子構造や原子核の構造に関して知見をえることができる．ここでは，入射粒子と標的系を構成している粒子が区別できるものと仮定して，多粒子系による粒子の散乱の問題の扱い方について説明する．

N 個の粒子からなる標的系に粒子を衝突させるとき，この系を記述する全ハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}_0+\hat{V}, \qquad \hat{H}_0 = \hat{H}_n+\hat{H}_{\mathrm{A}} \tag{4.1}$$

で与えられる．ここで $\hat{H}_n=\hat{\boldsymbol{p}}_n^2/2m$ は，質量 m の入射粒子の自由ハミルトニアンである．$\hat{H}_{\mathrm{A}}$ は N 個の粒子からなる標的系の複雑なハミルトニアンを表わし，また $\hat{V}$ は入射粒子と標的系を構成するすべての粒子との間の相互作用ハミルトニアンで

$$\hat{V} = \sum_{\alpha=1}^{N}\hat{V}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N}V(\hat{\boldsymbol{r}}_n-\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha) \tag{4.2}$$

で与えられるものとする．ここで $\hat{\boldsymbol{r}}_n$ は入射粒子の位置演算子，$\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha$ は標的のなかの α 番目の粒子の位置演算子である．このとき，体系の初状態は，$\hat{H}_0$ の固有値問題

$$\hat{H}_0|\boldsymbol{k}_i,\mathrm{A}_i\rangle = E_i|\boldsymbol{k}_i,\mathrm{A}_i\rangle \tag{4.3}$$

の解 $|\boldsymbol{k}_i,\mathrm{A}_i\rangle$ で指定される．ここで

$$\begin{aligned}&\hat{H}_n|\boldsymbol{k}_i\rangle = \mathcal{E}_i|\boldsymbol{k}_i\rangle, \qquad \hat{H}_{\mathrm{A}}|\mathrm{A}_i\rangle = E_i{}^{\mathrm{A}}|\mathrm{A}_i\rangle,\\ &|\boldsymbol{k}_i,\mathrm{A}_i\rangle = |\boldsymbol{k}_i\rangle|\mathrm{A}_i\rangle, \qquad E_i = \mathcal{E}_i+E_i{}^{\mathrm{A}}\end{aligned} \tag{4.4}$$

で，$|\boldsymbol{k}_i\rangle$ の位置表示は

$$\langle\boldsymbol{r}_n|\boldsymbol{k}_i\rangle = \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{r}_n} \tag{4.5}$$

であるとする．

この系の散乱を記述する演算子 $\hat{T}$ のみたす方程式は，(2.10)により

$$\hat{T}(E_i) = \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(E_i)\hat{T}(E_i) \tag{4.6}$$

である．ここで $E_i + i\varepsilon$ を省略して，E_i と書いている．なお，(4.6)で $\hat{G}_0(E_i) = (E_i - \hat{H}_0 + i\varepsilon)^{-1}$ である．(4.6)の右辺を逐次に展開して(4.2)を代入すると

$$\begin{aligned}\hat{T}(E_i) &= \hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(E_i)\hat{V} + \hat{V}\hat{G}_0(E_i)\hat{V}\hat{G}_0(E_i)\hat{V} + \cdots \\ &= \sum_{\alpha}\hat{V}_\alpha + \sum_{\alpha,\beta}\hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\hat{V}_\beta + \sum_{\alpha,\beta,\gamma}\hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\hat{V}_\beta\hat{G}_0(E_i)\hat{V}_\gamma + \cdots\end{aligned} \tag{4.7}$$

となる．ここで $\alpha, \beta, \gamma, \cdots$ の和は標的粒子全体にわたる和を意味する．(4.7)の展開式では，入射粒子と各標的粒子の間の相互作用 $\hat{V}_\alpha$ が乱雑に含まれていて，散乱過程に見通しのよい解釈を与えることができない．そこで，(4.7)の展開式を次のようにまとめ直すことにする．ここで，演算子 $\hat{\Lambda}_\alpha(E_i)$ を次のように定義する．

$$\hat{\Lambda}_\alpha(E_i) \equiv \hat{V}_\alpha + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\sum_{\beta}\hat{V}_\beta + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\sum_{\beta}\hat{V}_\beta\hat{G}_0(E_i)\sum_{\gamma}\hat{V}_\gamma + \cdots. \tag{4.8}$$

すると明らかに

$$\hat{T}(E_i) = \sum_{\alpha}\hat{\Lambda}_\alpha(E_i) \tag{4.9}$$

である．さて，(4.8)の展開式で，β に関する和を $\beta=\alpha$ の項と，それ以外の項に分割する．すると

$$\begin{aligned}\hat{\Lambda}_\alpha(E_i) &= \hat{V}_\alpha + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\hat{V}_\alpha + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\sum_{\gamma}\hat{V}_\gamma + \cdots \\ &\quad + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\sum_{\beta\neq\alpha}\hat{V}_\beta + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\sum_{\beta\neq\alpha}\hat{V}_\beta\hat{G}_0(E_i)\sum_{\gamma}\hat{V}_\gamma + \cdots \\ &= \hat{V}_\alpha + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)[\hat{V}_\alpha + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\sum_{\gamma}\hat{V}_\gamma + \cdots] \\ &\quad + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\sum_{\beta\neq\alpha}[\hat{V}_\beta + \hat{V}_\beta\hat{G}_0(E_i)\sum_{\gamma}\hat{V}_\gamma + \cdots]\end{aligned}$$

となる．これを(4.8)と比較すると

$$\hat{\Lambda}_\alpha(E_i) = \hat{V}_\alpha + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\hat{\Lambda}_\alpha(E_i) + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\sum_{\beta\neq\alpha}\hat{\Lambda}_\beta(E_i)$$

である．ここで右辺の第2項を左辺に移項して割り算をすると

$$\hat{\Lambda}_\alpha(E_i) = \hat{T}_\alpha(E_i) + \hat{T}_\alpha(E_i)\hat{G}_0(E_i)\sum_{\beta\neq\alpha}\hat{\Lambda}_\beta(E_i) \tag{4.10}$$

となる．ここで

$$\hat{T}_\alpha(E_i) = [1-\hat{V}_\alpha \hat{G}_0(E_i)]^{-1}\hat{V}_\alpha \tag{4.11}$$

である．(4.10)の右辺を逐次に展開して，その結果を(4.9)に代入すると

$$\hat{T}(E_i) = \sum_\alpha \hat{T}_\alpha(E_i) + \sum_\alpha \sum_{\beta\neq\alpha} \hat{T}_\alpha(E_i)\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_\beta(E_i) + \sum_\alpha \sum_{\beta\neq\alpha}\sum_{\gamma\neq\beta} \hat{T}_\alpha(E_i)\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_\beta(E_i)\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_\gamma(E_i) + \cdots \tag{4.12}$$

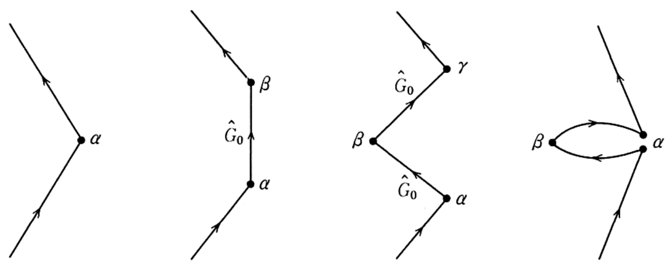
と表わされる．(4.12)の展開式は，(4.7)の素朴な展開式に比べて，きわめて見通しのよい形になっている．(4.11)は

$$\begin{aligned}\hat{T}_\alpha(E_i) &= \hat{V}_\alpha + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\hat{V}_\alpha + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\hat{V}_\alpha + \cdots \\ &= \hat{V}_\alpha + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)[\hat{V}_\alpha + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\hat{V}_\alpha + \cdots]\end{aligned}$$

であるから，

$$\hat{T}_\alpha(E_i) = \hat{V}_\alpha + \hat{V}_\alpha\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_\alpha(E_i) \tag{4.13}$$

と書きかえられる．この $\hat{T}_\alpha(E_i)$ は入射粒子と標的系のなかの α 番目の粒子との相互作用 $\hat{V}_\alpha$ を全部完全にとりこんだ厳密な散乱振幅である．したがって，(4.12)の展開式の右辺の第1項は，図7.5(a)に示すように，入射粒子のそれぞれの標的粒子による散乱の振幅の和を与える．また第2項は，図7.5(b)にあるように，2個の標的粒子による2重散乱の効果を表わすものである．同様に第3項は，3個の標的粒子による3重散乱を表わす．このなかには，$\gamma=\alpha$ の項も含まれていることに注意しよう．これは図7.5(d)にあるように，入射粒子がはじめ粒子 α によって散乱され，次に別の粒子 β に衝突し，そして再び最初の粒子 α によって散乱される過程を記述するものである．すなわち，(4.12)の展開式は，このような多重散乱に関する展開式になっている．



(a)　1重散乱　(b)　2重散乱　(c)　3重散乱　(d)　3重散乱

図7.5　多重散乱

そこでまず，1個の標的粒子による散乱振幅 $\hat{T}_\alpha(E_i)$ を求めておく必要がある．(4.13)の右辺の $\hat{G}_0(E_i)$ は

$$\hat{G}_0(E_i) = \frac{1}{E_i-(\hat{H}_n+\hat{H}_{\mathrm{A}})+i\varepsilon} \tag{4.14}$$

で与えられる．この $\hat{G}_0$ に対して次の近似を行う．すなわち，入射粒子が標的粒子の一つに衝突すると標的系の状態は変化するが，標的全体からみたとき，その変化は小さいとして，その変化を無視するのである．このとき(4.14)の分母の $\hat{H}_{\mathrm{A}}$ は，初状態のエネルギー固有値 $E_i{}^{\mathrm{A}}$ でおきかえられる．すなわち

$$\hat{G}_0(E_i) \cong \hat{G}_n(\mathcal{E}_i) \equiv \frac{1}{E_i-(\hat{H}_n+E_i{}^{\mathrm{A}})+i\varepsilon} = \frac{1}{\mathcal{E}_i-\hat{H}_n+i\varepsilon} \tag{4.15}$$

と近似する．この近似を**インパルス近似**という．

次に，(4.13)で $\hat{V}_\alpha$ を次のように書きかえる．

$$V(\hat{\boldsymbol{r}}_n-\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha) = \mathrm{e}^{-i\hat{\boldsymbol{p}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha/\hbar}V(\hat{\boldsymbol{r}}_n)\mathrm{e}^{+i\hat{\boldsymbol{p}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha/\hbar}. \tag{4.16}$$

ここで $\hat{\boldsymbol{p}}_n$ は入射粒子の運動量演算子であり，右辺の指数関数は，第2章の(6.11)に与えた変位演算子である．(4.15)と(4.16)を利用すると，(4.13)は

$$\begin{aligned}\hat{T}_\alpha(E_i) &= \mathrm{e}^{-i\hat{\boldsymbol{p}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha/\hbar}[V(\hat{\boldsymbol{r}}_n)+V(\hat{\boldsymbol{r}}_n)\hat{G}_n(\mathcal{E}_i)V(\hat{\boldsymbol{r}}_n)+\cdots]\mathrm{e}^{i\hat{\boldsymbol{p}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha/\hbar}\\ &= \mathrm{e}^{-i\hat{\boldsymbol{p}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha/\hbar}\hat{t}(\mathcal{E}_i)\mathrm{e}^{i\hat{\boldsymbol{p}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha/\hbar}\end{aligned} \tag{4.17}$$

となる．ここで

$$\hat{t}(\mathcal{E}_i) = V(\hat{\boldsymbol{r}}_n)+V(\hat{\boldsymbol{r}}_n)\hat{G}_n(\mathcal{E}_i)\hat{t}(\mathcal{E}_i) \tag{4.18}$$

とおいた．この $\hat{t}(\mathcal{E}_i)$ に関する積分方程式は，入射粒子の力学量 $\hat{\boldsymbol{r}}_n$ と $\hat{\boldsymbol{p}}_n$ だけを含んでいて，標的粒子の変数 $\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha$ にはよらないことに注意されたい．すなわち，(4.18)の方程式は，原点を中心とするポテンシャル $V(\hat{\boldsymbol{r}}_n)$ による1粒子の散乱を記述する方程式である．

そこで，(4.17)の行列要素をとると

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{k}_f,\mathrm{A}_f|\hat{T}_\alpha(E_i)|\boldsymbol{k}_i,\mathrm{A}_i\rangle &= \langle\boldsymbol{k}_f,\mathrm{A}_f|\mathrm{e}^{-i\hat{\boldsymbol{p}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha/\hbar}\hat{t}(\mathcal{E}_i)\mathrm{e}^{i\hat{\boldsymbol{p}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha/\hbar}|\boldsymbol{k}_i,\mathrm{A}_i\rangle\\ &= \langle\boldsymbol{k}_f|\hat{t}(\mathcal{E}_i)|\boldsymbol{k}_i\rangle\langle\mathrm{A}_f|\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}_f\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha}\cdot\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}_i\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha}|\mathrm{A}_i\rangle\end{aligned} \tag{4.19}$$

となる．ここで第3章の(5.20)および(5.64)を用いると，入射粒子の低エネルギーの極限で，散乱振幅は

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2}\langle\boldsymbol{k}_f|V(\hat{\boldsymbol{r}}_n)|\psi_i{}^{(+)}\rangle = -\alpha$$

で与えられる．ここでαは散乱の長さである．したがって

$$\langle \boldsymbol{k}_f | \hat{t}(\mathcal{E}_i) | \boldsymbol{k}_i \rangle = \langle \boldsymbol{k}_f | \hat{V}(\boldsymbol{r}_n) | \psi_i^{(+)} \rangle \cong \frac{2\pi\hbar^2}{m}\alpha \tag{4.20}$$

である．これより(4.19)は，αを用いて

$$\langle \boldsymbol{k}_f, \mathrm{A}_f | \hat{T}_\alpha(E_i) | \boldsymbol{k}_i, \mathrm{A}_i \rangle \cong \frac{2\pi\hbar^2}{m}\alpha \langle \mathrm{A}_f | \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_f)\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha} | \mathrm{A}_i \rangle \tag{4.21}$$

と表わすことができる．

問62　単位体積中にN個の原子を含む一様な物体に，波数kの粒子を投射するとき，その物体による入射粒子の屈折率nが

$$n = 1 + \frac{2\pi}{k^2} N f(0)$$

で与えられることを示せ．ここで$f(\theta=0)$は，入射粒子の標的原子による前方散乱の振幅である．

(1)　van Hove の公式

多数の原子からなる物体の構造をさぐる方法の一つとして，原子炉で生産される遅い中性子を物体に投射する中性子回折の方法が広く利用されている．ここでは上に展開した理論をこの問題に適用する．標的として利用する物体の厚さがうすいとき，標的内での中性子の多重散乱の効果は無視することができる．そのときには，(4.12)の展開式の第1項だけをとったらよい．(4.12)の右辺の第1項に(4.21)を代入すると

$$\langle \boldsymbol{k}_f, \mathrm{A}_f | \hat{T}(E_i) | \boldsymbol{k}_i, \mathrm{A}_i \rangle \cong \frac{2\pi\hbar^2}{m}\alpha \sum_\alpha \langle \mathrm{A}_f | \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_\alpha} | \mathrm{A}_i \rangle \tag{4.22}$$

となる．ここでmは中性子の質量，$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_f$は中性子の波数ベクトルの変化である．一方，(2.4)によると，散乱された中性子の単位エネルギー幅当りの微分断面積は

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\theta)}{\mathrm{d}\mathcal{E}_f} = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \cdot \frac{k_f}{k_i} \sum_{\mathrm{A}_f, \mathrm{A}_i} \delta(E_f - E_i) P_i |\langle \boldsymbol{k}_f, \mathrm{A}_f | \hat{T}(E_i) | \boldsymbol{k}_i, \mathrm{A}_i \rangle|^2 \tag{4.23}$$

で与えられる．ここでP_iは標的系の初状態に関する知識の不足を反映して，それを混合状態として記述するための統計的な重みである．(4.22)を(4.23)に代入して，(4.23)のエネルギーに関するデルタ関数を Fourier 積分の形で表わ

すと

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\theta)}{\mathrm{d}\mathscr{E}_f} = \frac{k_f}{k_i}\left(\frac{\alpha^2}{2\pi\hbar}\right)\sum_{\mathrm{A}_i,\mathrm{A}_f}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{i(\mathscr{E}_f-\mathscr{E}_i)t/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{i(E_f{}^{\mathrm{A}}-E_i{}^{\mathrm{A}})t/\hbar}$$
$$\times\sum_{\alpha,\beta}P_i\langle\mathrm{A}_i|\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_\alpha}|\mathrm{A}_f\rangle\langle\mathrm{A}_f|\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_\beta}|\mathrm{A}_i\rangle$$
$$= \frac{k_f}{k_i}\left(\frac{\alpha^2}{2\pi\hbar}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-i\omega t}$$
$$\times\sum_{\alpha,\beta}\sum_{\mathrm{A}_i,\mathrm{A}_f}P_i\langle\mathrm{A}_i|\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha}|\mathrm{A}_f\rangle\langle\mathrm{A}_f|\mathrm{e}^{i\hat{H}_\mathrm{A}t/\hbar}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\beta}\mathrm{e}^{-i\hat{H}_\mathrm{A}t/\hbar}|\mathrm{A}_i\rangle$$
$$= \frac{k_f}{k_i}\cdot\frac{\alpha^2}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-i\omega t}\sum_{\alpha,\beta}\sum_{\mathrm{A}_i}P_i\langle\mathrm{A}_i|\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(0)}\cdot\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\beta(t)}|\mathrm{A}_i\rangle$$
$$= \frac{k_f}{k_i}\cdot\frac{\alpha^2}{2\pi\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-i\omega t}\sum_{\alpha,\beta}\langle\!\langle\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(0)}\cdot\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\beta(t)}\rangle\!\rangle \tag{4.24}$$

と表わすことができる．ここで $\hbar\omega=\mathscr{E}_i-\mathscr{E}_f$ とおき，3 番目の等号では標的系の固有状態に関する完全性

$$\sum_f|\mathrm{A}_f\rangle\langle\mathrm{A}_f| = 1$$

を用い，また

$$\hat{\boldsymbol{r}}_\beta(t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}_\mathrm{A}t/\hbar}\hat{\boldsymbol{r}}_\beta\mathrm{e}^{-i\hat{H}_\mathrm{A}t/\hbar} \tag{4.25}$$

は，標的系に関する Heisenberg 演算子であり，$\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(0)=\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha$ である．したがって(4.23)は

$$\frac{\mathrm{d}\sigma(\theta)}{\mathrm{d}\mathscr{E}_f} = N\alpha^2\frac{k_f}{k_i}\cdot S(\boldsymbol{k},\omega) \tag{4.26}$$

と書くことができる．ここで N は標的の全粒子数で，

$$S(\boldsymbol{k},\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar N}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-i\omega t}\sum_{\alpha,\beta}\langle\!\langle\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(0)}\cdot\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\beta(t)}\rangle\!\rangle \tag{4.27}$$

を**力学的構造因子**という．これは物体内の原子の分布とその分布の時間的変動を記述する関数である．また，(4.26)の表式を **van Hove の公式**という．(4.26)の左辺の微分断面積を測定して，それから $S(\boldsymbol{k},\omega)$ を決定することによって，物体の原子構造に関する知見がえられる．

問 63 N 個の原子からなる理想気体に遅い中性子を照射したとき，(4.27)の構造因子 $S(\boldsymbol{k},\omega)$ のうち $\alpha=\beta$ の部分は

$$S(\boldsymbol{k},\omega) = \sqrt{\frac{\beta M}{2\pi\hbar^2 k^2}}\exp\left[-\frac{\beta M}{2k^2}\left(\omega-\frac{\hbar k^2}{2M}\right)^2\right]$$

であることを示せ．このとき，理想気体はBoltzmann分布をしているものとする．また，Mは気体を構成する原子の質量，$\beta=1/k_{\mathrm{B}}T$で，Tは絶対温度，k_{B}はBoltzmann定数である．

(2) 光学ポテンシャル

原子核に中性子が衝突するとき，中性子にとって原子核の存在を近似的には，原子核の領域にわたるポテンシャルとみなすことができる．原子核のこのような模型を**光学模型**といい，そのポテンシャルを**光学ポテンシャル**という．ここでは，入射する中性子が原子核内の核子と多重弾性散乱をするという考えにもとづいて，この光学ポテンシャルを導くことにする．

いまの問題では，(4.1)の$\hat{H}_n$は入射中性子のハミルトニアンで，$\hat{H}_{\mathrm{A}}$は原子核のハミルトニアンを表わす．このとき，中性子の散乱状態は

$$|\psi_i^{(+)}\rangle = \hat{U}(0,-\infty)|\boldsymbol{k}_i,\mathrm{A}_i\rangle = [1+\hat{G}(E_i)\hat{V}]|\boldsymbol{k}_i,\mathrm{A}_i\rangle \qquad (4.28)$$

で与えられる．ここで

$$\hat{G}(E_i) = [E_i-\hat{H}+i\varepsilon]^{-1}$$

であり，$\hat{V}=\sum_\alpha \hat{V}_\alpha$は中性子と原子核を構成するすべての核子の間の相互作用である．さて，

$$\hat{U}(E_i) \equiv 1+\hat{G}(E_i)\hat{V} \qquad (4.29)$$

で演算子$\hat{U}(E_i)$を定義する．ただし，この演算子$\hat{U}(E_i)$は初状態$|\boldsymbol{k}_i,\mathrm{A}_i\rangle$に作用させたときにのみ物理的意味をもつので，これまでの$\hat{U}(0,-\infty)$のように，任意の状態ベクトルに対して意味をもつ本当の演算子とはいえないことに注意しよう．(4.29)を(1.22)の公式を用いて変形すると

$$\hat{U}(E_i) = 1+\hat{G}_0(E_i)\hat{V}\hat{U}(E_i) = 1+\hat{G}_0(E_i)\left[\sum_\alpha \hat{V}_\alpha\right]\hat{U}(E_i), \qquad (4.30)$$

または(2.9)を用いて

$$\hat{U}(E_i) = 1+\hat{G}_0(E_i)\hat{T}(E_i) \qquad (4.31)$$

と表わすこともできる．(4.31)の右辺の$\hat{T}(E_i)$に(4.12)の展開式を代入すると

$$\hat{U}(E_i)=1+\sum_{\alpha}\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_{\alpha}(E_i)+\sum_{\alpha}\sum_{\beta\neq\alpha}\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_{\alpha}(E_i)\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_{\beta}(E_i)+\cdots \tag{4.32}$$

となる．

ここでさらに，演算子 $\hat{\Omega}_{\alpha}(E_i)$ を積分方程式

$$\hat{\Omega}_{\alpha}(E_i)=1+\sum_{\beta\neq\alpha}\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_{\beta}(E_i)\hat{\Omega}_{\beta}(E_i) \tag{4.33}$$

の解として定義する．この右辺を逐次に展開すると

$$\hat{\Omega}_{\alpha}(E_i)=1+\sum_{\beta\neq\alpha}\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_{\beta}(E_i)+\sum_{\beta\neq\alpha}\sum_{\gamma\neq\beta}\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_{\beta}(E_i)\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_{\gamma}(E_i)+\cdots \tag{4.34}$$

である．(4.34)を用いると，(4.32)は

$$\begin{aligned}\hat{U}(E_i)&=1+\sum_{\beta=\mathrm{all}}\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_{\beta}(E_i)\hat{\Omega}_{\beta}(E_i)\\&=1+\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_{\alpha}(E_i)\hat{\Omega}_{\alpha}(E_i)+\sum_{\beta\neq\alpha}\hat{G}_0(E_i)\hat{T}_{\beta}(E_i)\hat{\Omega}_{\beta}(E_i)\end{aligned} \tag{4.35}$$

と表わされる．(4.33)と(4.35)の右辺を比較すると，両者の相違点は，(4.35)の右辺の第2項の $\beta=\alpha$ の項が存在するか否かだけであることに注意する．そこで，(4.35)の右辺の第3項に比して第2項からの寄与が無視できるものと仮定する．すなわち，1重散乱に比して多重散乱のほうが大きいと仮定する．この近似を**光学近似**という．この近似のもとでは，(4.35)の $\hat{U}(E_i)$ と(4.33)の $\hat{\Omega}_{\alpha}(E_i)$ は同じものとなる．すると，(4.35)の2番目の表式の $\hat{\Omega}_{\beta}(E_i)$ を $\hat{U}(E_i)$ におきかえることができて，(4.35)は

$$\hat{U}(E_i)=1+\hat{G}_0(E_i)\left[\sum_{\beta=\mathrm{all}}\hat{T}_{\beta}(E_i)\right]\hat{U}(E_i) \tag{4.36}$$

と近似することができる．これを(4.30)の右辺と比較すると，光学ポテンシャル $\hat{V}_{\mathrm{op}}$ は

$$\hat{V}_{\mathrm{op}}=\sum_{\alpha=\mathrm{all}}\hat{T}_{\alpha}(E_i) \tag{4.37}$$

で与えられることになる．

入射中性子のエネルギーが低いときには(4.20)が成立する．一方

$$\langle \boldsymbol{k}_f | \hat{t}(\mathcal{E}_i) | \boldsymbol{k}_i \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3 r_n \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_f)\cdot \boldsymbol{r}_n} t(\mathcal{E}_i)$$

であるから，これを(4.20)と比較すると

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3 r_n \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}_i - \boldsymbol{k}_f)\cdot \boldsymbol{r}_n} t(\mathcal{E}_i) = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\alpha.$$

この関係がみたされるためには

$$t(\mathcal{E}_i) = (2\pi\hbar^2/m)\alpha\delta^3(\boldsymbol{r}_n) \tag{4.38}$$

でなければならない．この結果を(4.17)に代入すると，

$$\begin{aligned} \hat{T}_\alpha(E_i) &= \frac{2\pi\hbar^2}{m}\alpha \mathrm{e}^{-i\hat{\boldsymbol{p}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha}\delta^3(\hat{\boldsymbol{r}}_n)\mathrm{e}^{i\hat{\boldsymbol{p}}_n\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha/\hbar} \\ &= \frac{2\pi\hbar^2}{m}\alpha\delta^3(\hat{\boldsymbol{r}}_n - \hat{\boldsymbol{r}}_\alpha). \end{aligned} \tag{4.39}$$

したがって，(4.37)の位置表示をとると

$$V_{\mathrm{op}}(\boldsymbol{r}_n) = \frac{2\pi\hbar^2}{m}\alpha \sum_{\alpha=1}^{N}\delta^3(\boldsymbol{r}_n - \boldsymbol{r}_\alpha)$$

をえる．ここで原子核内の核子の密度分布関数が

$$\rho(\boldsymbol{r}) = (1/N)\sum_{\alpha=1}^{N}\delta^3(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_\alpha)$$

で表わされることを利用すると，光学ポテンシャルは

$$V_{\mathrm{op}}(\boldsymbol{r}_n) = (2\pi\hbar^2/m)N\alpha\rho(\boldsymbol{r}_n) \tag{4.40}$$

で与えられる．すなわち，低エネルギーの中性子からみた原子核は，その大きさの範囲にわたってひろがっているポテンシャル $V_{\mathrm{op}}(\boldsymbol{r}_n)$ とみなすことができる．なお，中性子のエネルギーが少し高くなると，(4.38)の $t(\mathcal{E}_i)$ は実数の散乱の長さ α だけで表わすことができなくなり，一般にはその値は複素数となる．このときには，光学ポテンシャルは虚数部分をもつことになるが，これは原子核による中性子の吸収過程を記述する．

第8章

量子電磁気学

§1　電磁場の量子化

量子論の出発点は，Planck の熱放射の理論よりも，むしろ Einstein の光の粒子性の発見であるといってよい．ところが，これまで述べてきた量子力学の理論は，電子のように本来粒子であるとされていた物質の示す波動性を理解するための理論であった．光の波動性と粒子性を統一的に理解しようとする理論は，1927 年に Dirac によってはじめてとりあげられ，それに続いて Fermi や Heisenberg および Pauli により発展されて，いわゆる量子電磁気学の理論体系が構成された．第 2 次世界大戦の戦中戦後にかけて，量子電磁気学は Tomonaga，Schwinger および Feynman らによって，相対論的に共変的な形式に再定式化され，この理論にもとづいて，Lamb シフトと電子の異常磁気モーメントを驚くべき精度で説明することに成功した．この理論は，電子と電磁場からなる系だけでなく，他の素粒子系を扱うときのお手本として，現在でも基本的な役割を果している．

電磁場の量子力学を構成するにはどうしたらよいだろうか．よく知られているように，真空中の電磁場はベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}^c(\boldsymbol{x},t)$ で記述される．ここで右肩の c は，それが古典的量であることを示す．この $\boldsymbol{A}^c(\boldsymbol{x},t)$ が波動方程式をみたすことから，光の波動性が導かれる．一方，1 個の電子の状態を記述する状態関数 $\psi(\boldsymbol{q},t)$ も多くの場合に波動的なふるまいを示す．しかしこの状態関数 $\psi(\boldsymbol{q},t)$ は，$\boldsymbol{A}^c(\boldsymbol{x},t)$ のような実在の波動を示すものではなく，電子を位置 $\boldsymbol{q}$ に発見する確率振幅である．したがって，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}^c(\boldsymbol{x},t)$ を状態関数 $\psi(\boldsymbol{q},t)$ に対応させることはできない．そこでいま，N 個の粒子からなる古典的体系をとり，それらの粒子の位置座標を $\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_N$ と

する．古典力学では，これらの粒子の座標を時間 t の関数として記述し，それらの関数の形 $q_i{}^c(t)$ を規定するのが Newton の運動方程式である．ここで $i=1, 2, \cdots, 3N$ で，これは N 個の粒子の $3N$ 個の自由度を表わしている．そこで $q_i{}^c(t)$ を $q^c(i, t)$ と書いて，それをそれぞれの場所 $\boldsymbol{x}$ におけるベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}^c(\boldsymbol{x}, t)$ と比較すると，$q^c \longleftrightarrow \boldsymbol{A}^c$，$i \longleftrightarrow \boldsymbol{x}$ の対応関係を認めることができる．すなわち，物理量 $\boldsymbol{A}^c$ に対応するのは粒子の位置座標 q^c であり，またパラメーター $\boldsymbol{x}$ に対応するのは粒子の自由度 i である．このとき，粒子の自由度 i のとる値が $3N$ 個であるのに対して，空間内の場所 $\boldsymbol{x}$ を指定するパラメーター $\boldsymbol{x}$ は連続的な値をとる．すなわち，$q^c(i, t)$ が自由度 $3N$ の体系を記述するのに対して，電磁場 $\boldsymbol{A}^c(\boldsymbol{x}, t)$ は連続無限の自由度をもつ体系を記述していると解釈される．

ここで量子力学に移行する．このとき，N 個の粒子を記述する c 数の力学量 $q^c(i, t)$ は，Heisenberg 表示の理論を用いると，Heisenberg 演算子 $q(i, t)$ におきかえられる．これにともなって，これらの演算子の作用する状態関数 $\psi(q(1), q(2), \cdots, q(N))$ が導入されるわけである．これに対応して，電磁場の量子力学では，古典電磁場を記述する c 数 $\boldsymbol{A}^c(\boldsymbol{x}, t)$ が，Heisenberg 演算子 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$ におきかえられ，それにともなって $\Psi[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_1), \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_2), \cdots, \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_\infty)]$ という無限連続個の変数 $\{\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_n)\}$ の関数としての状態関数が考えられることになる．ここで，パラメーター $\boldsymbol{x}$ のとる値を $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_\infty$ と書いたが，本当は $\boldsymbol{x}$ のとる値は連続的であって，状態関数を上のように表現するのは正しくない．むしろ状態関数 Ψ は，$\boldsymbol{x}$ のあらゆる値に対して与えられる無限連続個の変数 $\boldsymbol{A}$ の関数，すなわち $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ の関数形の関数とみなされるべきであろう．そこで，その状態関数を $\Psi[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})]$ と書いて，これを関数 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ の**汎関数**という．このように考えると，電磁場の量子力学を構成するには，第2章§8に説明した量子化の手続きにしたがい，そこでの $q(t)$ に対応する物理量としてベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t)$ を採用し，これによって記述される物理的体系に対して Lagrange 形式の理論をつくり，さらにそれにもとづいて正準形式の理論に進めばよいことになる．

そこで，質量 m，電荷 e の N 個の粒子と電磁場とからなる古典的体系を考えて，その系のラグランジアンとして

$$L = \sum_{i=1}^{N}\left[\frac{1}{2}m\boldsymbol{v}_i^2(t) - e\phi(\boldsymbol{r}_i(t),t) + e\boldsymbol{v}_i(t)\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i(t),t)\right] + \frac{1}{2}\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\left[\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{x},t) - \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{x},t)\right] \tag{1.1}$$

を仮定する．ここで $\boldsymbol{v}_i(t)\equiv\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i(t)/\mathrm{d}t$ であり，$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{B}$ はベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ とスカラー・ポテンシャル ϕ により

$$\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x},t) \equiv -\frac{\partial\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} - \mathrm{grad}\,\phi(\boldsymbol{x},t), \quad \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x},t) \equiv \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t) \tag{1.2}$$

で**定義**されるものとする．また L^3 は考えている空間領域の体積である．いまの段階では，(1.1)の $\boldsymbol{r}_i(t)$ と(1.2)の $\boldsymbol{A}$ および ϕ は独立な任意関数である．(1.2)の定義により，Faraday の電磁誘導の法則および磁場に関する Gauss の法則

$$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{E} + \frac{\partial\boldsymbol{B}}{\partial t} = 0, \qquad \mathrm{div}\,\boldsymbol{B} = 0 \tag{1.3}$$

は，任意の $\boldsymbol{A}$ と ϕ に対して自動的にみたされている．

(1.1)のラグランジアンで記述される体系に対して，変分原理（Hamilton の原理）

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} L\,\mathrm{d}t = 0 \tag{1.4}$$

を適用する．この変分原理によって導かれるのは，Lorentz 力のもとでの粒子系の運動方程式と，電磁場に関する Ampère-Maxwell の法則および電場に関する Gauss の法則である．

まずはじめ，粒子の位置 $\boldsymbol{r}_i(t)$ に関する変分 $\delta\boldsymbol{r}_i(t)$ をとろう．(1.1)のラグランジアンは各粒子に対するそれの和になっているので，そのうちの 1 個の粒子をとって，粒子の番号 i は省略しよう．変分 $\delta\boldsymbol{r}(t)$ の作用積分の両端での値は，$\delta\boldsymbol{r}(t_1)=\delta\boldsymbol{r}(t_2)=0$ であるとする．ここで，$\boldsymbol{r}(t)$ の 3 個の座標成分を $x_i(t)$ $(i=1,2,3)$ と書いて，部分積分をすると

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} L\mathrm{d}t = \delta\int_{t_1}^{t_2}\mathrm{d}t\left[\frac{1}{2}m\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)^2 - e\phi(\boldsymbol{r},t) + e\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right]$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left[m \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \delta \boldsymbol{r} - e \,\mathrm{grad}\, \phi \cdot \delta \boldsymbol{r} + e \frac{\mathrm{d}\delta \boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t) + \sum_{i=1}^{3} e \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial x_i} \delta x_i \right]$$
$$= \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left[-m \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} \cdot \delta \boldsymbol{r} - e \,\mathrm{grad}\, \phi \cdot \delta \boldsymbol{r} - e \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t} \cdot \delta \boldsymbol{r} + \sum_{i=1}^{3} e \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial x_i} \delta x_i \right]$$
$$= \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left[-m \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} \cdot \delta \boldsymbol{r} - e \,\mathrm{grad}\, \phi \cdot \delta \boldsymbol{r} - e \sum_{i=1}^{3} \left\{ \frac{\partial A_i}{\partial t} + \sum_{j=1}^{3} \left(\frac{\partial A_i}{\partial x_j} - \frac{\partial A_j}{\partial x_i} \right) \frac{\mathrm{d}x_j}{\mathrm{d}t} \right\} \delta x_i \right]$$
$$= \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \left[-m \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} - e \,\mathrm{grad}\, \phi - e \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} + e \left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \times \mathrm{rot}\, \boldsymbol{A} \right) \right] \cdot \delta \boldsymbol{r}$$
$$= 0$$

となる．この 4 番目の等号では，$\mathrm{d}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)/\mathrm{d}t = \partial \boldsymbol{A}/\partial t + \sum_j (\partial \boldsymbol{A}/\partial x_j)(\mathrm{d}x_j/\mathrm{d}t)$ を用いている．さて，変分関数 $\delta \boldsymbol{r}(t)$ は任意関数であるから，

$$m \frac{\mathrm{d}^2 \boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t^2} = e\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}_i, t) + e \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t} \times \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}_i, t). \tag{1.5}$$

これは Lorentz 力のもとでの Newton の運動方程式である．ここで(1.2)の定義式を用いている．

次にスカラー・ポテンシャル $\phi(\boldsymbol{x}, t)$ の変分をとり，$\delta\phi(\boldsymbol{x} = \pm L, t) = 0$ とする．(1.1)で ϕ を含む項だけを残すと，部分積分によって

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L \mathrm{d}t = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \int_{L^3} \mathrm{d}^3 x \left[-\sum_{i=1}^{N} e \delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{r}_i) \delta \phi(\boldsymbol{x}, t) \right.$$
$$\left. + \varepsilon_0 \left(-\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} - \mathrm{grad}\, \phi \right) (-\mathrm{grad}\, \delta \phi(\boldsymbol{x}, t)) \right]$$
$$= \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \int_{L^3} \mathrm{d}^3 x \left[-\sum_{i=1}^{N} e \delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{r}_i) + \varepsilon_0 \,\mathrm{div}\, \boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}, t) \right] \delta \phi(\boldsymbol{x}, t)$$
$$= 0$$

となる．したがって，電場に関する Gauss の法則

$$\mathrm{div}\, \boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}, t) = \sum_{i=1}^{N} e \delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{r}_i(t))/\varepsilon_0 \tag{1.6}$$

がえられる．

最後に，ベクトル・ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ の変分をとって，$\delta \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} = \pm L, t) = \delta \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t_1) = \delta \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t_2) = 0$ であるとすると，

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L \mathrm{d}t = \delta \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \int_{L^3} \mathrm{d}^3 x \left[e \sum_{i=1}^{N} \delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{r}_i) \boldsymbol{v}_i \cdot \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}, t) + \frac{\varepsilon_0}{2} \boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{x}, t) - \frac{1}{2\mu_0} \boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{x}, t) \right]$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \int_{L^3} \mathrm{d}^3 x \left[\sum_{i=1}^{N} e\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{v}_i \cdot \delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t) + \varepsilon_0 \boldsymbol{E} \cdot \left(-\frac{\partial}{\partial t}\delta\boldsymbol{A}\right) - \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}\cdot \mathrm{rot}\, \delta\boldsymbol{A} \right]$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t \int_{L^3} \mathrm{d}^3 x \left[\sum_{i=1}^{N} e\boldsymbol{v}_i \delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i) + \frac{\partial \boldsymbol{D}}{\partial t} - \mathrm{rot}\, \boldsymbol{H} \right] \cdot \delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x},t) = 0$$

となる．ここで $\boldsymbol{D}=\varepsilon_0\boldsymbol{E}$, $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{B}/\mu_0$ であり，また最後の等号では，ベクトル解析の公式

$$\mathrm{div}(\boldsymbol{H}\times\delta\boldsymbol{A}) = \delta\boldsymbol{A}\cdot\mathrm{rot}\,\boldsymbol{H} - \boldsymbol{H}\cdot\mathrm{rot}\,\delta\boldsymbol{A}$$

を用いて，部分積分をし表面積分を落している．上の変分の結果から

$$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x},t) = \frac{\partial \boldsymbol{D}(\boldsymbol{x},t)}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} e\boldsymbol{v}_i(t)\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i(t)) \qquad (1.7)$$

がえられる．これは Ampère-Maxwell の法則にほかならない．このようにして，(1.1)の ラグランジアン を用いて変分原理を適用することにより，粒子の運動方程式(1.5)と Maxwell の方程式がえられた．

次に Hamilton の正準形式に移行する．粒子の位置座標 $\boldsymbol{r}_i$ の正準共役量 $\boldsymbol{p}_i$ は，(1.1)より

$$\boldsymbol{p}_i = \partial L/\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i = m\boldsymbol{v}_i + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i,t) \qquad (1.8)$$

で定義される．電磁場における正準共役量を求めるため，空間領域 L^3 を微小領域 $\Delta^3 x_\alpha$ の和に分割して，それぞれの場所に番号 α をつけると，(1.1)の右辺の第 2 項は

$$\frac{1}{2}\int_{L^3}\left[\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{x},t) - \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{x},t)\right]\mathrm{d}^3x = \sum_\alpha \frac{1}{2}\left[\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{x}_\alpha,t) - \frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{x}_\alpha,t)\right]\Delta^3 x_\alpha$$

と表わされる．この場合，$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_\alpha,t)$ と $\phi(\boldsymbol{x}_\alpha,t)$ に対する正準共役量は，それぞれ

$$\begin{aligned} \pi_l(\boldsymbol{x}_\alpha,t) &= \frac{\partial L}{\partial(\partial A_l(\boldsymbol{x}_\alpha,t)/\partial t)} = -\varepsilon_0\left[-\frac{\partial A_l(\boldsymbol{x}_\alpha,t)}{\partial t} - \frac{\partial\phi}{\partial x_l}(\boldsymbol{x}_\alpha,t)\right]\Delta^3 x_\alpha \\ &= -\varepsilon_0 E_l(\boldsymbol{x}_\alpha,t)\Delta^3 x_\alpha, \\ \pi_0(\boldsymbol{x}_\alpha,t) &= \frac{\partial L}{\partial(\partial\phi(\boldsymbol{x}_\alpha,t)/\partial t)} = 0 \end{aligned} \qquad (1.9)$$

で与えられる．このとき，$\boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{x}_\alpha,t)/(\varepsilon_0\Delta^3 x_\alpha)$ が電場 $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}_\alpha,t)$ の符号を変えたものに等しく，またスカラー・ポテンシャル ϕ に対する正準共役量が 0 である

ことに注目されたい．(1.9)を用いると，全系のハミルトニアン H は

$$H = \sum_i \boldsymbol{p}_i(t)\cdot\boldsymbol{v}_i(t) + \sum_\alpha \boldsymbol{\pi}(\boldsymbol{x}_\alpha, t)\cdot\frac{\partial \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_\alpha, t)}{\partial t} - L$$

で定義される．ここで，(1.8)と(1.9)を用いて $\boldsymbol{v}_i$ と $\partial\boldsymbol{A}/\partial t$ を消去し，$\Delta^3 x_\alpha\to 0$ の極限をとれば

$$H = \sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2m}\Big[\boldsymbol{p}_i(t)-e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i, t)\Big]^2+\frac{1}{2}\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\Big[\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2(\boldsymbol{x}, t)+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2(\boldsymbol{x}, t)\Big]$$
$$+e\sum_{i=1}^{N}\phi(\boldsymbol{r}_i, t)+\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\,\varepsilon_0\boldsymbol{E}(\boldsymbol{x}, t)\cdot\mathrm{grad}\,\phi(\boldsymbol{x}, t)$$

となる．ここで右辺の第4項を部分積分して，(1.6)の Gauss の法則を代入すると

$$\int_{L^3}\varepsilon_0\boldsymbol{E}\cdot\mathrm{grad}\,\phi\,\mathrm{d}^3x = -\int_{L^3}\varepsilon_0\phi\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{E}\,\mathrm{d}^3x = -\sum_{i=1}^{N}e\phi(\boldsymbol{r}_i, t)$$

となり，これは第3項と相殺してしまう．すなわち，系のハミルトニアンは

$$H = \sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2m}\Big[\boldsymbol{p}_i(t)-e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_i, t)\Big]^2+\frac{1}{2}\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\Big[\varepsilon_0\boldsymbol{E}^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\Big] \tag{1.10}$$

で与えられる．

ハミルトニアン(1.10)をちょっと見ると，点電荷間の Coulomb 力による相互作用のエネルギーが含まれていないように見える．上に見たように，スカラー・ポテンシャルからの寄与が相殺してしまったからである．ところが実は，この Coulomb の相互作用エネルギーは，(1.10)の第2項のなかの電場のエネルギーのなかに含まれているのである．このことを示すために，(1.2)，(1.6)および(1.7)の Maxwell の方程式をもう少し詳しく調べよう．これらの方程式をもういちど書いておくと

$$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{H} = \partial\boldsymbol{D}/\partial t+\boldsymbol{i}, \qquad \mathrm{div}\,\boldsymbol{D} = \rho, \tag{1.11}$$

$$\boldsymbol{E} = -\partial\boldsymbol{A}/\partial t-\mathrm{grad}\,\phi, \qquad \boldsymbol{B} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} \tag{1.12}$$

である．ここで

$$\boldsymbol{i}(\boldsymbol{x}, t) = \sum_{i=1}^{N}e\boldsymbol{v}_i(t)\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i(t)), \qquad \rho(\boldsymbol{x}, t) = \sum_{i=1}^{N}e\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i(t)). \tag{1.13}$$

(1.12)を(1.11)に代入すると

$$\left(\triangle-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\boldsymbol{A}-\mathrm{grad}\left(\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+\frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = -\mu_0\boldsymbol{i},$$
$$\left(\triangle-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\phi+\frac{\partial}{\partial t}\left(\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+\frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right) = -\rho/\varepsilon_0 \tag{1.14}$$

となる．

さて，古典電磁気学でよく知られているように，電磁ポテンシャル $\boldsymbol{A}$ と ϕ に対して，任意関数 λ を用いたゲージ変換

$$\boldsymbol{A}\longrightarrow\boldsymbol{A}' = \boldsymbol{A}+\mathrm{grad}\,\lambda,\qquad \phi\longrightarrow\phi' = \phi-\partial\lambda/\partial t \tag{1.15}$$

をほどこしても，(1.12)は同じ電磁場を与える．すなわち

$$\boldsymbol{E} = -\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial t}-\mathrm{grad}\,\phi = -\frac{\partial\boldsymbol{A}'}{\partial t}-\mathrm{grad}\,\phi',$$
$$\boldsymbol{B} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}'$$

であり，また(1.14)もその形を変えることなく

$$\left(\triangle-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\boldsymbol{A}'-\mathrm{grad}\left(\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}'+\frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi'}{\partial t}\right) = -\mu_0\boldsymbol{i},$$
$$\left(\triangle-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\phi'+\frac{\partial}{\partial t}\left(\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}'+\frac{1}{c^2}\frac{\partial\phi'}{\partial t}\right) = -\rho/\varepsilon_0$$

が成立する．電磁ポテンシャルのもつこの不定性を利用して，(1.14)の連立微分方程式を簡単な形にするのが，Lorentz 条件 $\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+(1/c^2)\partial\phi/\partial t=0$ であり，この条件をみたす電磁ポテンシャルが **Lorentz ゲージ**の電磁ポテンシャルである．しかしここでは，後に述べる理由により，Lorentz ゲージのかわりに，**Coulomb ゲージ**(放射ゲージともいう)を採用する．それは，(1.15)の任意関数 λ として

$$\triangle\lambda^{(\mathrm{C})} = -\mathrm{div}\,\boldsymbol{A} \tag{1.16}$$

の解に制限する方法である．この $\lambda^{(\mathrm{C})}$ を用いると，(1.15)のゲージ変換は

$$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})} = \boldsymbol{A}+\mathrm{grad}\,\lambda^{(\mathrm{C})},\qquad \phi^{(\mathrm{C})} = \phi-\partial\lambda^{(\mathrm{C})}/\partial t \tag{1.17}$$

となる．このとき $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}$ は，(1.16)の条件により

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})} = \mathrm{div}\,\boldsymbol{A}+\triangle\lambda^{(\mathrm{C})} = 0 \tag{1.18}$$

である．(1.17)で与えられ，(1.18)の条件をみたす電磁ポテンシャル $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}$ と $\phi^{(\mathrm{C})}$ を Coulomb ゲージの電磁ポテンシャルという．このとき(1.12)は

$$\boldsymbol{E} = -\partial \boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}/\partial t - \mathrm{grad}\,\phi^{(\mathrm{C})}, \qquad \boldsymbol{B} = \mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})} \tag{1.19}$$

と表わされ，また(1.14)の方程式は

$$\left(\triangle - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})} = -\mu_0 \boldsymbol{i} + \frac{1}{c^2}\mathrm{grad}\frac{\partial \phi^{(\mathrm{C})}}{\partial t}, \qquad \triangle\phi^{(\mathrm{C})} = -\rho/\varepsilon_0 \tag{1.20}$$

となる．ここで，$\triangle\chi=0$ の解を用いて，さらにゲージ変換

$$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})\prime} = \boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})} + \mathrm{grad}\,\chi, \qquad \phi^{(\mathrm{C})\prime} = \phi^{(\mathrm{C})} - \partial\chi/\partial t$$

をほどこすと，$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})\prime}$ と $\phi^{(\mathrm{C})\prime}$ も(1.19)と(1.20)を不変に保つ．しかし，χ が無限大の空間の全領域にわたって有界であるとすると，$\triangle\chi=0$ の解は定数以外には存在しない．つまり，$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})\prime}=\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}$, $\phi^{(\mathrm{C})\prime}=\phi^{(\mathrm{C})}$ である．したがって，いたるところで有界な χ を用いる限り，Coulomb ゲージの電磁ポテンシャルは一義的に決まり不定性をもたない．これが $(\triangle - c^{-2}\partial^2/\partial t^2)\chi=0$ の解をとったとき，なお $\boldsymbol{A}'=\boldsymbol{A}+\mathrm{grad}\,\chi$，$\phi'=\phi-\partial\chi/\partial t$ の不定性を許す Lorentz ゲージの電磁ポテンシャルを用いるよりも，Coulomb ゲージの電磁ポテンシャルを利用したほうが便利な理由の一つである．

Coulomb ゲージの電磁ポテンシャルのみたす(1.20)の方程式をもう少し詳しく調べるために，まずベクトル $\boldsymbol{i}(\boldsymbol{x},t)$ を

$$\boldsymbol{i}(\boldsymbol{x},t) = \sum_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{i}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} \tag{1.21}$$

と Fourier 展開しておく．ここで $\boldsymbol{k}$ の方向に垂直で，たがいに直交する単位ベクトル $\boldsymbol{e}^{(1)}(\boldsymbol{k})$ と $\boldsymbol{e}^{(2)}(\boldsymbol{k})$，および $\boldsymbol{k}$ 方向の単位ベクトル $\boldsymbol{e}^{(3)}(\boldsymbol{k})=\boldsymbol{k}/|\boldsymbol{k}|$ を導入する．また，これらの3個の単位ベクトルが，$\boldsymbol{k}$ のすべての値に対して右手系を形成するように

$$\boldsymbol{e}^{(1)}(\boldsymbol{k}) = \boldsymbol{e}^{(1)}(-\boldsymbol{k}), \qquad \boldsymbol{e}^{(2)}(\boldsymbol{k}) = -\boldsymbol{e}^{(2)}(-\boldsymbol{k}) \tag{1.22}$$

であるとする．$\boldsymbol{e}^{(3)}(\boldsymbol{k})$ については，定義により

$$\boldsymbol{e}^{(3)}(\boldsymbol{k}) = -\boldsymbol{e}^{(3)}(-\boldsymbol{k}) \tag{1.23}$$

である．$\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ $(\lambda=1,2,3)$ のカーテシアン座標系 (x,y,z) での成分を $e_j^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ と書くと

$$\sum_{j=1}^{3} e_j^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})e_j^{(\mu)}(\boldsymbol{k}) = \delta_{\lambda,\mu}, \qquad \sum_{\lambda=1}^{3} e_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})e_j^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}) = \delta_{i,j} \tag{1.24}$$

が成立する*．(1.21)の右辺のベクトル $\boldsymbol{i}(\boldsymbol{k},t)$ をこれらの3個の基本ベクト

ルを用いて

$$\boldsymbol{i}(\boldsymbol{k},t)=\sum_{\lambda=1}^{3}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k},t)$$

と表わして，これを(1.21)に代入すると

$$\boldsymbol{i}(\boldsymbol{x},t)=\sum_{\boldsymbol{k}}\left[\sum_{\lambda=1}^{2}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{e}^{(3)}(\boldsymbol{k})i^{(3)}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right]$$

となる．ここで

$$\begin{aligned}\boldsymbol{i}_{\perp}(\boldsymbol{x},t)&=\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1}^{2}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}},\\ \boldsymbol{i}_{\parallel}(\boldsymbol{x},t)&=\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{e}^{(3)}(\boldsymbol{k})i^{(3)}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\end{aligned}\tag{1.25}$$

とおけば，任意のベクトルを

$$\boldsymbol{i}(\boldsymbol{x},t)=\boldsymbol{i}_{\perp}(\boldsymbol{x},t)+\boldsymbol{i}_{\parallel}(\boldsymbol{x},t)\tag{1.26}$$

と分解することができる．このとき

＊　原点Oから引いた位置ベクトルを $\boldsymbol{r}$ とし，これのカーテシアン座標系での成分を (x_1',x_2',x_3') と書き，その系の基本ベクトルを $\boldsymbol{e}^{(x)}\equiv\boldsymbol{e}_1$, $\boldsymbol{e}^{(y)}\equiv\boldsymbol{e}_2$, $\boldsymbol{e}^{(z)}\equiv\boldsymbol{e}_3$ と表わす．また特定の $\boldsymbol{k}$ に対する基本ベクトル $\boldsymbol{e}^{(1)}(\boldsymbol{k})$, $\boldsymbol{e}^{(2)}(\boldsymbol{k})$, $\boldsymbol{e}^{(3)}(\boldsymbol{k})$ の方向の同じ $\boldsymbol{r}$ の成分を (x_1,x_2,x_3) とすると

$$\boldsymbol{r}=\sum_{\lambda}x_{\lambda}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})=\sum_{j}x_j'\boldsymbol{e}_j$$

である．これに $\boldsymbol{e}_i$ を掛けて，$\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{e}_j=\delta_{i,j}$ を用いると

$$x_i'=\sum_{\lambda}x_{\lambda}e_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\tag{1}$$

となる．ここで $e_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})=\boldsymbol{e}_i\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ は，ベクトル $\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ の $\boldsymbol{e}_i$ 方向の成分である．ベクトルの長さは不変であるから

$$\sum_i x_i'x_i'=\sum_i\sum_{\lambda,\mu}x_{\lambda}e_i^{(\lambda)}x_{\mu}e_i^{(\mu)}=\sum_{\lambda}x_{\lambda}x_{\lambda}.$$

したがって

$$\sum_i e_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})e_i^{(\mu)}(\boldsymbol{k})=\delta_{\lambda,\mu}\tag{2}$$

である．(1)の逆変換は，(2)により

$$\sum_i x_i'e_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})=\sum_i\sum_{\mu}x_{\mu}e_i^{(\mu)}(\boldsymbol{k})e_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})=\sum_{\mu}x_{\mu}\delta_{\mu,\lambda}=x_{\lambda}$$

であるから，

$$x_{\lambda}=\sum_j x_j'e_j^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\tag{3}$$

で与えられる．したがって，長さの不変性より

$$\sum_{\lambda}x_{\lambda}x_{\lambda}=\sum_{\lambda}\sum_{i,j}x_i'x_j'e_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})e_j^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})=\sum_j x_j'x_j'.$$

これから

$$\sum_{\lambda}e_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})e_j^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})=\delta_{i,j}.\tag{4}$$

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{i}_\perp = i\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1}^{2}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\,i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} = 0,$$

$$\mathrm{rot}\,\boldsymbol{i}_\parallel = i\sum_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{e}^{(3)}(\boldsymbol{k})\times\boldsymbol{k})\,i^{(3)}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} = i\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k})}{|\boldsymbol{k}|}\,i^{(3)}(\boldsymbol{k},t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} = 0 \tag{1.27}$$

である．すなわち，任意のベクトル $\boldsymbol{i}(\boldsymbol{x},t)$ は(1.27)をみたす二つの部分 $\boldsymbol{i}_\perp$ と $\boldsymbol{i}_\parallel$ に分解できる．ベクトル解析では，これを **Helmholtz の定理**という．

さて，(1.11)の第1式の発散をとり，第2式を代入すると，電荷保存則

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{i}+\partial\rho/\partial t = 0$$

がえられる．これに(1.26)を代入して(1.27)の第1式に注意すると

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{i}_\parallel+\partial\rho/\partial t = 0 \tag{1.28}$$

となる．一方，(1.27)の第2式より，一般に $\boldsymbol{i}_\parallel=\mathrm{grad}\,\psi$ と書くことができる．これを(1.28)に代入すれば

$$\triangle\psi = -\partial\rho/\partial t$$

である．この方程式と(1.20)の第2式と比較すると，$\psi=\varepsilon_0\partial\phi^{(\mathrm{C})}/\partial t$ である．これより $\boldsymbol{i}_\parallel$ は Coulomb ゲージのスカラー・ポテンシャル $\phi^{(\mathrm{C})}$ により

$$\mu_0\boldsymbol{i}_\parallel = \frac{1}{c^2}\,\mathrm{grad}\,\frac{\partial\phi^{(\mathrm{C})}}{\partial t}$$

と表わされる．これと(1.26)を(1.20)の第1式に代入すると

$$\left(\triangle-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})} = -\mu_0\boldsymbol{i}_\perp, \qquad \triangle\phi^{(\mathrm{C})} = -\rho/\varepsilon_0. \tag{1.29}$$

また(1.19)の電場も

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_\perp+\boldsymbol{E}_\parallel;\qquad \boldsymbol{E}_\perp = -\partial\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}/\partial t,\quad \boldsymbol{E}_\parallel = -\mathrm{grad}\,\phi^{(\mathrm{C})} \tag{1.30}$$

と分解される．このとき(1.18)の条件により

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{E}_\perp = -\partial/\partial t(\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}) = 0,\qquad \mathrm{rot}\,\boldsymbol{E}_\parallel = -\mathrm{rot}\,\mathrm{grad}\,\phi^{(\mathrm{C})} = 0,$$

$$\mathrm{div}\,\boldsymbol{E}_\parallel = -\mathrm{div}\,\mathrm{grad}\,\phi^{(\mathrm{C})} = -\triangle\phi^{(\mathrm{C})} = \rho/\varepsilon_0 \tag{1.31}$$

をみたす．

ハミルトニアン(1.10)を Coulomb ゲージの電磁ポテンシャルを用いて表わすと

$$H = \sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{p}_i-e\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r}_i,t)\right]^2+\frac{1}{2}\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\left[\varepsilon_0(\boldsymbol{E}_\perp+\boldsymbol{E}_\parallel)^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\right] \tag{1.32}$$

である．そこで(1.32)の電場のエネルギーの項を調べる．すなわち，それは

$$\frac{1}{2}\varepsilon_0\int_{L^3}\mathrm{d}^3x[\boldsymbol{E}_\perp{}^2+(2\boldsymbol{E}_\perp+\boldsymbol{E}_\parallel)\cdot\boldsymbol{E}_\parallel] = \frac{1}{2}\varepsilon_0\int_{L^3}\mathrm{d}^3x[\boldsymbol{E}_\perp{}^2-(2\boldsymbol{E}_\perp+\boldsymbol{E}_\parallel)\cdot\mathrm{grad}\,\phi^{(\mathrm{C})}]$$

$$= \frac{1}{2}\varepsilon_0\int_{L^3}\mathrm{d}^3x[\boldsymbol{E}_\perp{}^2+(2\,\mathrm{div}\,\boldsymbol{E}_\perp+\mathrm{div}\,\boldsymbol{E}_\parallel)\phi^{(\mathrm{C})}] = \frac{1}{2}\varepsilon_0\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\left[\boldsymbol{E}_\perp{}^2+\frac{1}{\varepsilon_0}\rho\phi^{(\mathrm{C})}\right]$$

と変形される．ここで1番目の等号では(1.30)の第3式を，3番目の等号では(1.31)を用いた．一方，(1.29)の第2式の解は

$$\phi^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{x},t) = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\int_{L^3}\mathrm{d}^3x'\,\frac{\rho(\boldsymbol{x}',t)}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}$$

である．これを上の式に代入して(1.13)を利用すると

$$\frac{1}{2}\varepsilon_0\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\,\boldsymbol{E}^2 = \frac{1}{2}\varepsilon_0\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\,\boldsymbol{E}_\perp{}^2+\frac{1}{8\pi\varepsilon_0}\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\int_{L^3}\mathrm{d}^3x'\,\frac{\rho(\boldsymbol{x},t)\rho(\boldsymbol{x}',t)}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}$$

$$= \frac{1}{2}\varepsilon_0\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\,\boldsymbol{E}_\perp{}^2+\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\sum_{i,j}\frac{1}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|}$$

となる．これより，(1.32)のハミルトニアンは

$$H = \sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{p}_i-e\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r}_i,t)\right]^2+\frac{1}{2}\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\left[\varepsilon_0\boldsymbol{E}_\perp{}^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\right]+\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\sum_{i,j}\frac{1}{|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|} \tag{1.33}$$

と表わされる．ここで $\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}=0$, $\mathrm{div}\,\boldsymbol{E}_\perp=0$ であるから，(1.33)の $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}$ と $\boldsymbol{E}_\perp$ は横波の電磁波を表わし，右辺の第3項は点電荷間のCoulombの相互作用エネルギーである．なおこの項には $i=j$ の項が含まれていて，その値は無限大である．これは点電荷のもつ静電的自己エネルギーにほかならない．以上で古典論の議論を終わる．

ここで第2章§8の処法にしたがって，正準共役量の間に正準交換関係を設定することによって量子力学に移行する．

まず粒子系に対しては，次の正準交換関係

$$[\hat{x}_i(t),\hat{p}_j(t)] = i\hbar\delta_{i,j}, \qquad [\hat{x}_i(t),\hat{x}_j(t)] = [\hat{p}_i(t),\hat{p}_j(t)] = 0 \tag{1.34}$$

を要求すればよい．次にハミルトニアン(1.33)で記述される電磁場を量子化するに当って，$A_i{}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{x}_\alpha,t)$ と，(1.9)で定義されたその正準共役量 $\pi_i(\boldsymbol{x}_\alpha,t)$ の間の交換関係として

$$[\hat{A}_i^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{x}_\alpha, t), \hat{\pi}_j(\boldsymbol{x}_\beta, t)] = i\hbar\delta_{i,j}\delta_{\alpha,\beta}$$

を要求するわけにはいかない．なぜなら，$\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}=0$ の条件があるため，$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}$ の3個の成分は独立ではないからである．一般に束縛条件があるときには量子化は難しくなる．(1.14)の段階でLorentz条件を利用しなかったのも，実はそのためである．Lorentzゲージの電磁ポテンシャルを用いて量子化をしようとすると，不定計量の状態ベクトル空間というものを導入せざるをえなくなり，その方法は極めて技巧的かつ人工的なものになってしまうのである．さて，任意のベクトルに対して成立する(1.26)と(1.27)をみると，$\mathrm{div}\,\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}=0$ の条件をみたさせるためには，$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}$ を体積 L^3 の立方体の表面上で，第5章(2.18)の条件のもとで

$$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})[C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)*}(t)\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}] \quad (1.35)$$

とFourier展開しておけばよいことが分かる．(1.35)の発散をとったとき，$\lambda=1,2$ に対して $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})=0$ だからである．一方，(1.31)より $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}$ の正準共役量である電場 $\boldsymbol{E}_\perp$ もまた $\mathrm{div}\,\boldsymbol{E}_\perp=0$ の条件のもとにあるので，

$$\boldsymbol{E}_\perp(\boldsymbol{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})i\omega_{\boldsymbol{k}}[C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)*}(t)\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}] \quad (1.36)$$

と展開する．ここで $\omega_{\boldsymbol{k}}$ はいまのところ未定の $\boldsymbol{k}$ の関数である．なおこのとき，(1.35)と(1.36)の $C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)$ と $C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)*}(t)$ $(\lambda=1,2)$ は，$\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}$ や $\boldsymbol{E}_\perp$ とちがって独立な関数である．(1.35)と(1.36)を(1.33)のハミルトニアンの第2項に代入して，(1.24)の第1式と，

$$\frac{1}{L^3}\int_{L^3}\mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{x}}\mathrm{d}^3x = \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}$$

を利用する．このとき第5章(2.18)の条件より，$k_x=2\pi n_x/L$ で $n_x=0, \pm1, \pm2, \cdots$である．$k_y, k_z$ についても同様である．すると

$$\begin{aligned}\frac{\varepsilon_0}{2}\int_{L^3}\boldsymbol{E}_\perp^2\,\mathrm{d}^3x &= \sum_{\boldsymbol{k}}\omega_{\boldsymbol{k}}^2[C_{\boldsymbol{k}}^{(1)*}C_{\boldsymbol{k}}^{(1)}+C_{\boldsymbol{k}}^{(2)*}C_{\boldsymbol{k}}^{(2)}]\\ &\quad -\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda,\mu=1,2}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{e}^{(\mu)}(-\boldsymbol{k})\omega_{\boldsymbol{k}}^2[C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}C_{-\boldsymbol{k}}^{(\mu)}+C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)*}C_{-\boldsymbol{k}}^{(\mu)*}]\end{aligned}$$

となる．また，ベクトル解析の公式

$$(\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{B})\cdot(\boldsymbol{C}\times\boldsymbol{D}) = (\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C})(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{D})-(\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{C})(\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{D})$$

より，$\lambda,\mu=1,2$ に対して

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))\cdot(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{e}^{(\mu)}(\boldsymbol{k})) &= k^2(\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{e}^{(\mu)}(\boldsymbol{k}))-(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}^{(\mu)}(\boldsymbol{k}))\\ &= \delta_{\lambda,\mu}k^2\end{aligned}$$

である．ここで $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})=0$ ($\lambda=1,2$) を用いた．すると

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\mu_0}\int_{L^3}\boldsymbol{B}^2\mathrm{d}^3x &= \frac{1}{2\mu_0}\int_{L^3}(\mathrm{rot}\,\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})})^2\mathrm{d}^3x\\ &= \sum_{\boldsymbol{k}}c^2k^2[C_{\boldsymbol{k}}^{(1)*}C_{\boldsymbol{k}}^{(1)}+C_{\boldsymbol{k}}^{(2)*}C_{\boldsymbol{k}}^{(2)}]\\ &\quad+\frac{1}{2}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda,\mu=1,2}c^2k^2\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{e}^{(\mu)}(-\boldsymbol{k})[C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}C_{-\boldsymbol{k}}^{(\mu)}+C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)*}C_{-\boldsymbol{k}}^{(\mu)*}]\end{aligned}$$

と表わされる．そこで $\omega_{\boldsymbol{k}}=ck$ と選べば

$$\frac{1}{2}\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\left[\varepsilon_0\boldsymbol{E}_{\perp}{}^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\right] = 2\sum_{\boldsymbol{k}}\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2[C_{\boldsymbol{k}}^{(1)*}(t)C_{\boldsymbol{k}}^{(1)}(t)+C_{\boldsymbol{k}}^{(2)*}(t)C_{\boldsymbol{k}}^{(2)}(t)] \tag{1.37}$$

となる．さらに

$$\begin{aligned}C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t) &= (1/2)[Q_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)+(i/\omega_{\boldsymbol{k}})P_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)],\\ C_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)*}(t) &= (1/2)[Q_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)-(i/\omega_{\boldsymbol{k}})P_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)]\end{aligned} \tag{1.38}$$

とおいて，新しい変数 $P_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)$ と $Q_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)$ を導入すると，(1.37)は

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2}\int_{L^3}\mathrm{d}^3x\left[\varepsilon_0\boldsymbol{E}_{\perp}{}^2+\frac{1}{\mu_0}\boldsymbol{B}^2\right]\\ &= \sum_{\boldsymbol{k}}\left[\frac{1}{2}\left(P_{\boldsymbol{k}}^{(1)2}(t)+\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2Q_{\boldsymbol{k}}^{(1)2}(t)\right)+\frac{1}{2}\left(P_{\boldsymbol{k}}^{(2)2}(t)+\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2Q_{\boldsymbol{k}}^{(2)2}(t)\right)\right]\end{aligned} \tag{1.39}$$

となる．この結果を第2章(9.7)の調和振動子のハミルトニアンと比較すると，それらは全く同じ形である．すなわち，電磁場は波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ に垂直な $\boldsymbol{e}^{(1)}(\boldsymbol{k})$ と $\boldsymbol{e}^{(2)}(\boldsymbol{k})$ の方向に振動する調和振動子の集合体とみなすことができる．そこで，第2章(9.7)にならって，Heisenberg 表示の正準交換関係として，$\lambda,\mu=1,2$ に対して

$$\begin{aligned}[\hat{Q}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\,\hat{P}_{\boldsymbol{k}'}^{(\mu)}(t)] &= i\hbar\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\mu},\\ [\hat{Q}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\,\hat{Q}_{\boldsymbol{k}'}^{(\mu)}(t)] &= [\hat{P}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\,\hat{P}_{\boldsymbol{k}'}^{(\mu)}(t)] = 0\end{aligned} \tag{1.40}$$

を要求する．なお，粒子と電磁場の演算子はすべて互いに交換可能とする．

(1.38)を(1.35)と(1.36)に代入して，$Q_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}$ と $P_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}$ を(1.40)の交換関係をみたす演算子におきかえると

$$\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{x},t)=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\left[\hat{Q}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}-\frac{1}{\omega_{\boldsymbol{k}}}\hat{P}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)\sin\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\right],$$
$$\hat{\boldsymbol{E}}_{\perp}(\boldsymbol{x},t)=\frac{-1}{\sqrt{\varepsilon_0 L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\omega_{\boldsymbol{k}}\left[\hat{Q}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)\sin\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}+\frac{1}{\omega_{\boldsymbol{k}}}\hat{P}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)\cos\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}\right] \tag{1.41}$$

と表わされる．また，(1.40)と(1.38)より

$$[\hat{C}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\hat{C}_{\boldsymbol{k}'}^{(\mu)\dagger}(t)]=(\hbar/2\omega_{\boldsymbol{k}})\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\mu}$$

をえる．そこで，$\lambda=1,2$ に対して

$$\hat{C}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)=\sqrt{\hbar/2\omega_{\boldsymbol{k}}}\,\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\quad \hat{C}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}(t)=\sqrt{\hbar/2\omega_{\boldsymbol{k}}}\,\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}(t) \tag{1.42}$$

とおくと

$$[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\hat{a}_{\boldsymbol{k}'}^{(\mu)\dagger}(t)]=\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\mu},$$
$$[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\hat{a}_{\boldsymbol{k}'}^{(\mu)}(t)]=[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}(t),\hat{a}_{\boldsymbol{k}'}^{(\mu)\dagger}(t)]=0 \tag{1.43}$$

となる．さらに，(1.42)を用いると，(1.35)と(1.36)を演算子とみなしたときの表式は

$$\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{x},t)=\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}(t)\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}],$$
$$\hat{\boldsymbol{E}}_{\perp}(\boldsymbol{x},t)=+i\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0 L^3}}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}(t)\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}] \tag{1.44}$$

で与えられる．

ここで，正準共役量としての $\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}$ と $\hat{\boldsymbol{E}}_{\perp}$ の間に成立する交換関係を求めておこう．(1.43)の交換関係にもとづいて，(1.44)の $\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}$ と $\hat{\boldsymbol{E}}_{\perp}$ の交換関係を計算すると

$$\begin{aligned}[\hat{A}_i^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{x},t),\hat{E}_{\perp,j}(\boldsymbol{x}',t)]&=-\frac{i\hbar}{\varepsilon_0 L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}\left(\delta_{i,j}-\frac{k_i k_j}{\boldsymbol{k}^2}\right)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}\\&=-\frac{i\hbar}{\varepsilon_0}\left[\delta_{i,j}\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')+\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_j}\left(\frac{1}{4\pi|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}\right)\right]\end{aligned} \tag{1.45}$$

となり，右辺の第2項に余分な項が現われる．それは，(1.24)より

$$\sum_{\lambda=1,2} e_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})e_j^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}) = \sum_{\lambda=1}^{3} e_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})e_j^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}) - e_i^{(3)}(\boldsymbol{k})e_j^{(3)}(\boldsymbol{k})$$
$$= \delta_{i,j} - e_i^{(3)}(\boldsymbol{k})e_j^{(3)}(\boldsymbol{k})$$

であり，また

$$\frac{1}{L^3}\sum_{\boldsymbol{k}} \frac{\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}}{\boldsymbol{k}^2} = \frac{1}{4\pi}\frac{1}{|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'|}$$

となるからである．

(1.39)を(1.33)のハミルトニアンに代入して，これまでの Heisenberg 表示から Schrödinger 表示に変換すると，系のハミルトニアンは，時間によらない演算子を用いて

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{2m}[\hat{\boldsymbol{p}}_i{}^2 - e\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\hat{\boldsymbol{r}}_i)]^2 + \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\frac{1}{2}[\hat{P}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)2} + \omega_{\boldsymbol{k}}{}^2\hat{Q}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)2}]$$
$$+\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\sum_{i,j}\frac{1}{|\hat{\boldsymbol{r}}_i - \hat{\boldsymbol{r}}_j|} \qquad (1.46)$$

と表わされる．また，右辺の第 2 項を(1.42)で導入した演算子 $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ と $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}$ で表わすと

$$\hat{H}_{\mathrm{rad}} = \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(1)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(1)} + \frac{1}{2}\right] + \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(2)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(2)} + \frac{1}{2}\right] \qquad (1.47)$$

である．ここで調和振動子の場合にならって，$\hat{N}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)} \equiv \hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ と定義すると，(1.43)の交換関係より

$$[\hat{N}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}] = -\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}, \qquad [\hat{N}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}] = +\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}$$

がえられ，これより

$$\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}\rangle = \sqrt{n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}}\,|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}-1\rangle,$$
$$\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}\rangle = \sqrt{n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1}\,|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1\rangle$$

となる．ここで

$$\hat{N}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}\rangle = n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}\rangle$$

で，固有値 $n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ は $0, 1, 2, \cdots$ の 0 または正の整数である．これらの関係より，$\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}$ と $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ は生成・消滅演算子であることが分かる．

ここで電磁場の運動量を調べておこう．古典電磁気学によると，電磁場の運動量は

$$\boldsymbol{G}(t) = \varepsilon_0 \int_{L^3} \boldsymbol{E}_\perp(\boldsymbol{x}, t) \times \boldsymbol{B}(\boldsymbol{x}, t) \mathrm{d}^3 x$$

で与えられる*．これを Heisenberg 演算子におきかえて，(1.44)の $\hat{\boldsymbol{E}}_\perp$ と

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{B}}(\boldsymbol{x}, t) &= \mathrm{rot}\, \hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{x}, t) \\ &= i \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\lambda=1,2} \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3 \omega_{\boldsymbol{k}}}} (\boldsymbol{k} \times \boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})) [\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}(t) \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}} - \hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}(t) \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}]\end{aligned}$$

を代入して，Schrödinger 表示に移すと

$$\hat{\boldsymbol{G}} = \sum_{\boldsymbol{k}} \hbar \boldsymbol{k} [\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(1)\dagger} \hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(1)} + \hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(2)\dagger} \hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(2)}] \tag{1.48}$$

となる．ここで

$$|\boldsymbol{\Phi}\rangle = |n_{\boldsymbol{k}_1}{}^{(1)}\rangle |n_{\boldsymbol{k}_2}{}^{(1)}\rangle \cdots |n_{\boldsymbol{k}_\infty}{}^{(1)}\rangle \cdot |n_{\boldsymbol{k}_1}{}^{(2)}\rangle |n_{\boldsymbol{k}_2}{}^{(2)}\rangle \cdots |n_{\boldsymbol{k}_\infty}{}^{(2)}\rangle \tag{1.49}$$

とおくと，

$$\begin{aligned}\hat{H}_{\mathrm{rad}} |\boldsymbol{\Phi}\rangle &= \sum_{\boldsymbol{k}} [\hbar\omega_{\boldsymbol{k}} (n_{\boldsymbol{k}}{}^{(1)} + 1/2) + \hbar\omega_{\boldsymbol{k}} (n_{\boldsymbol{k}}{}^{(2)} + 1/2)] |\boldsymbol{\Phi}\rangle, \\ \hat{\boldsymbol{G}} |\boldsymbol{\Phi}\rangle &= \sum_{\boldsymbol{k}} [\hbar \boldsymbol{k} n_{\boldsymbol{k}}{}^{(1)} + \hbar \boldsymbol{k} n_{\boldsymbol{k}}{}^{(2)}] |\boldsymbol{\Phi}\rangle\end{aligned} \tag{1.50}$$

である．すなわち，(1.49)の状態ベクトル $|\boldsymbol{\Phi}\rangle$ は $\hat{H}_{\mathrm{rad}}$ と $\hat{\boldsymbol{G}}$ の同時固有ベクトルであり，その固有値は(1.50)の右辺の値をとる．この結果から，Einstein が主張したように，波数 $\boldsymbol{k}$ の電磁波は，$\boldsymbol{k}$ の方向に垂直な $\boldsymbol{e}^{(1)}(\boldsymbol{k})$ と $\boldsymbol{e}^{(2)}(\boldsymbol{k})$ の方向に偏り，エネルギー $\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}$ と運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ をもつ $n_{\boldsymbol{k}}{}^{(1)}$ 個と $n_{\boldsymbol{k}}{}^{(2)}$ 個の光子の集合体とみなすことができることが分かる．なお，(1.50)のエネルギーの固有値で $n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}=0$ としたとき，電磁場のエネルギーは $\sum_{\boldsymbol{k}} \hbar\omega_{\boldsymbol{k}}$ で与えられ，その値は無限大である．これを電磁波の**零点エネルギー**という．ここに場の量子論の欠陥の一端が現われているのであるが，この値は定数なので，この無限大の定数を差し引いたものをもって電磁波のエネルギーを定義しておけば，一応はこの難点を除去することができる．なお，ここで述べている光の粒子性とは，光子がエネルギー $\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}$ と運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ をもっていて，その数を1個，2個と数えることができるという意味である．このとき，その光子が空間内のどこにあるかということは全く分からないことに注意されたい．すなわち，光子は上のよう

＊　例えば，砂川重信「電磁気学」岩波書店(1987)，p. 237 を参照．

な意味では粒子としての性質をもっているが，古典的な粒子のように，それがある特定の空間領域を占めるという性質は全くもたない．粒子という言葉は，本来はその物体が空間内のある限定された領域に局在することを意味している．古典的粒子はまさにそういうものであり，その空間的局在性からの2次的な性質として，その数の可算性が導かれ，さらにこれにエネルギーや運動量などの力学的性質が付与されたのである．ところが，量子力学的な粒子としての光子の場合には，古典的粒子の1次的な性質であった空間的局在性は完全に捨て去られ，むしろその2次的な性質である可算性と，エネルギーや運動量などの力学的性質だけが残されて，それをもって粒子性といっているのである．

次に(1.46)のハミルトニアンの右辺の第1項を調べよう．粒子の正準演算子 $\hat{\boldsymbol{p}}_i$ と $\hat{\boldsymbol{r}}_i$ の位置表示をとると，その i 番目の粒子の項は

$$\frac{1}{2m}\left[\frac{\hbar}{i}\nabla_i - e\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r}_i)\right]^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_i - \frac{e}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\nabla_i\cdot\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r}_i)\right)$$
$$-\frac{e}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r}_i)\cdot\nabla_i\right) + \frac{e^2}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r}_i)\right)^2$$

である．これに粒子に関する任意の状態関数 $\psi(\boldsymbol{r}_i)$ を作用させると，右辺の第2項と第3項において

$$\begin{aligned}&(\nabla_i\cdot\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}\psi) + \hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}\cdot(\nabla_i\psi)\\ &\quad = (\nabla_i\cdot\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})})\psi + 2\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}\cdot(\nabla_i\psi) = 2\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}\cdot(\nabla_i\psi)\end{aligned}$$

となる．ここで(1.18)の Coulomb ゲージの条件 $\mathrm{div}\,\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})} \equiv \nabla\cdot\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})} = 0$ を用いた．したがって，(1.46)の第1項は

$$\hat{H}_m = \sum_{i=1}^{N}\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle_i - \frac{e\hbar}{im}\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r}_i)\cdot\nabla_i + \frac{e^2}{2m}\left(\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r}_i)\right)^2\right] \tag{1.51}$$

で与えられる．

最後に，(1.46)のハミルトニアン $\hat{H}$ を用いて，電磁波の Heisenberg の運動方程式を求めておこう．(1.46)を Heisenberg 表示にもどして，

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t), \hat{H}]\,; \quad \lambda = 1, 2$$

の右辺を計算する．ここで $\hat{H}$ は(1.47)と(1.51)および(1.46)の右辺の最後の Coulomb エネルギーの和で与えられる．このとき，(1.43)の交換関係により

$$\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\ \sum_{\boldsymbol{k}'}\sum_{\mu=1,2}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}'}\hat{a}_{\boldsymbol{k}'}^{(\mu)\dagger}(t)\,\hat{a}_{\boldsymbol{k}'}^{(\mu)}(t)\right]=\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\,\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)$$

であり，また

$$\begin{aligned}
&\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\ -\frac{e}{m}\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\hat{\boldsymbol{r}}_i(t),t)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}_i(t)\right]\\
&\quad=-\frac{e}{m}[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\ \hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\hat{\boldsymbol{r}}_i(t),t)]\cdot\hat{\boldsymbol{p}}_i(t)\\
&\quad=-\frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_i(t)}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\hat{\boldsymbol{p}}_i(t),\\
&\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\ \frac{e^2}{2m}\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}\cdot\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\hat{\boldsymbol{r}}_i(t),t)\right]\\
&\quad=\frac{e^2}{m}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\hat{\boldsymbol{r}}_i(t),t)\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_i(t)},\\
&\left[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t),\ \frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0}\sum_{i,j}\frac{1}{|\boldsymbol{r}_i(t)-\boldsymbol{r}_j(t)|}\right]=0
\end{aligned}$$

である．したがって，電磁波の Heisenberg の運動方程式は

$$\begin{aligned}
i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)}{\mathrm{d}t}&=\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\,\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)-\sum_{i=1}^{N}\frac{e}{m}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_i(t)}\\
&\qquad\times\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\{\hat{\boldsymbol{p}}_i(t)-e\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\hat{\boldsymbol{r}}_i(t),t)\}\\
&=\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\,\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}(t)-\sum_{i=1}^{N}e\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_i(t)}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\hat{\boldsymbol{v}}_i(t)\qquad(1.52)
\end{aligned}$$

で与えられる．これは，(1.29)の $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}$ の波動方程式を演算子方程式におきかえたものと同じものである．なお，最後の等号では(1.8)を用いた．

問 64　(1.34)の交換関係を用いて，(1.8)の関係で定義される速度演算子 $\hat{\boldsymbol{v}}(t)$ の交換関係

$$[\hat{x}_i(t),\hat{v}_j(t)]\quad\text{および}\quad[\hat{v}_i(t),\hat{v}_j(t)]$$

を求めよ．

問 65　(1.45)の交換関係が，$\mathrm{div}\,\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}=0$, $\mathrm{div}\,\hat{\boldsymbol{E}}_{\perp}=0$ の条件と矛盾しないことを証明せよ．

問 66　(1.52)の運動方程式とそのエルミート共役が，(1.29)の $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}$ の波動方程式を演算子方程式にしたものと同等であることを確かめよ．

§2 多重極展開

荷電粒子と電磁波の相互作用は，(1.51)のハミルトニアン $\hat{H}_m$ の右辺の第2項と第3項によって記述される．これらの相互作用に含まれるベクトル・ポテンシャル $\hat{\boldsymbol{A}}^{(C)}$ としては，それぞれの粒子の存在する位置 $\boldsymbol{r}_i$ における値をとらねばならない．いま，荷電粒子として電子を考え，それが原子核に束縛されて原子を構成しているとき，電子は原点Oに静止する原子核の近傍にある．一方，原子から放射される光の波長は，たいていの場合，原子の大きさに比してかなり長い．そのため原子内電子の分布する領域での光の波の空間的変動を無視することができる．このようなとき，(1.51)の $\hat{\boldsymbol{A}}^{(C)}(\boldsymbol{r}_i)$ を原点Oにおける $\hat{\boldsymbol{A}}^{(C)}(0)$ でおきかえることができる．この近似は，古典電磁気学における**電気双極子近似**に相当する．次に(1.51)のもう一つの問題は，相互作用が直接観測にはかからないベクトル・ポテンシャルで表わされていることである．この節の目的の一つは，このベクトル・ポテンシャルを消去して，相互作用を電場 $\hat{\boldsymbol{E}}_\perp$ や磁場 $\boldsymbol{B}$ そのもので表現しようということである．

Schrödinger 表示での系のハミルトニアンをもういちど書いておくと，

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}[\boldsymbol{p}-e\hat{\boldsymbol{A}}^{(C)}(\boldsymbol{r})]^2+\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}+1/2]+V(\boldsymbol{r}). \quad (2.1)$$

ここで，$\boldsymbol{p}=(\hbar/i)\nabla$ である．(2.1)では電子が1個しかないとしているが，これは記号の繁雑さを避けるためであって，電子が2個以上あって，その間に(1.46)の右辺の最後の項の Coulomb 相互作用があるときに以下の議論を一般化するのは容易である．なお，(2.1)の最後の項の $V(\boldsymbol{r})$ は，原点Oにある原子核による相互作用ポテンシャルを与えている．ここで，上に述べた計画を実施するために，(2.1)の $\hat{\boldsymbol{A}}^{(C)}(\boldsymbol{r})$ を原点Oの近傍で次のように展開する．

$$\hat{A}_i{}^{(C)}(\boldsymbol{r}) = \hat{A}_i{}^{(C)}(0)+x_k\frac{\partial\hat{A}_i{}^{(C)}}{\partial x_k}(0). \quad (2.2)$$

ここで，原子核の中心Oから測定した電子の位置ベクトルの成分を $\boldsymbol{r}=(x_1, x_2, x_3)$ と書き，相対論の記法にならって，一つの項のなかに同じ添字が2個現われるときには，その添字に関して和をとるものと約束する．

ベクトル・ポテンシャルを消去するために，Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{2.3}$$

に，ユニタリー変換

$$|\boldsymbol{\Phi}(t)\rangle = \hat{U}|\Psi(t)\rangle \tag{2.4}$$

をほどこすと，

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\boldsymbol{\Phi}(t)\rangle &= i\hbar\hat{U}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\Psi(t)\rangle = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}\cdot\hat{U}|\Psi(t)\rangle \\ &= \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}|\boldsymbol{\Phi}(t)\rangle \end{aligned} \tag{2.5}$$

となる．そこで

$$\hat{H}' = \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1} \tag{2.6}$$

と書き，

$$\begin{aligned} &\hat{U} = \mathrm{e}^{-ie\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r})/\hbar}, \\ &\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r}) = \hat{A}_m{}^{(\mathrm{C})}(0)x_m + \frac{1}{2}x_l x_m\frac{\partial\hat{A}_l{}^{(\mathrm{C})}}{\partial x_m}(0) \end{aligned} \tag{2.7}$$

と選ぶ．ここで，第2章(5.43)の公式を用いると

$$\begin{aligned} \hat{U}\Big(p_i - e\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r})\Big)\hat{U}^{-1} &= \Big(p_i - e\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r})\Big) + \Big(-\frac{ie}{\hbar}\Big)[\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r}), p_i - e\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r})] \\ &\quad + \frac{1}{2!}\Big(-\frac{ie}{\hbar}\Big)^2[\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r}), [\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r}), p_i - e\hat{A}_i(\boldsymbol{r})]] \\ &\quad + \cdots \end{aligned} \tag{2.8}$$

と展開される．(2.8)の右辺を次のように計算する．

$$\text{第1項} = p_i - e\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}(0) - ex_m\frac{\partial\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}}{\partial x_m}(0).$$

第2項では，$\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r})$ と $\hat{A}_i^{(\mathrm{C})}$ が交換可能であることから

$$\begin{aligned} \text{第2項} &= \Big(-\frac{ie}{\hbar}\Big)[\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r}), p_i] \\ &= \Big(-\frac{ie}{\hbar}\Big)[\hat{A}_m{}^{(\mathrm{C})}(0)x_m, p_i] + \frac{1}{2}\Big(\frac{-ie}{\hbar}\Big)\Big[x_l x_m\frac{\partial\hat{A}_l{}^{(\mathrm{C})}}{\partial x_m}(0), p_i\Big] \\ &= \Big(-\frac{ie}{\hbar}\Big)i\hbar\delta_{i,m}\hat{A}_m{}^{(\mathrm{C})}(0) + \frac{1}{2}\Big(\frac{-ie}{\hbar}\Big)i\hbar\{x_m\delta_{i,l} + x_l\delta_{m,i}\}\frac{\partial\hat{A}_l{}^{(\mathrm{C})}}{\partial x_m}(0) \end{aligned}$$

$$= e\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}(0) + \frac{1}{2}e\left\{x_m \frac{\partial \hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}}{\partial x_m}(0) + x_l \frac{\partial \hat{A}_l{}^{(\mathrm{C})}}{\partial x_i}(0)\right\}$$

となる．これと $\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r})$ は交換可能であるから，(2.8)の展開の第3項以下は全部0となる．したがって，

$$\hat{U}\left(p_i - e\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r})\right)\hat{U}^{-1} = p_i + \frac{e}{2}\left(x_l \frac{\partial \hat{A}_l{}^{(\mathrm{C})}}{\partial x_i}(0) - x_m \frac{\partial \hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}}{\partial x_m}(0)\right)$$

である．この右辺の第2項は

$$\{\boldsymbol{r} \times \mathrm{rot}\, \hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\}_i = x_l \frac{\partial \hat{A}_l{}^{(\mathrm{C})}}{\partial x_i}(0) - x_m \frac{\partial \hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}}{\partial x_m}(0) \tag{2.9}$$

であることから

$$\begin{aligned}\hat{U}\left(p_i - e\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r})\right)\hat{U}^{-1} &= p_i + \frac{e}{2}(\boldsymbol{r} \times \mathrm{rot}\, \hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0))_i \\ &= p_i + \frac{e}{2}(\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{B}}(0))_i \end{aligned} \tag{2.10}$$

と表わされて，ベクトル・ポテンシャルが消去される．(2.10)より

$$\begin{aligned}\hat{U}(\boldsymbol{p} - e\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r}))^2\hat{U}^{-1} &= \hat{U}(p_i - e\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r}))\hat{U}^{-1}\cdot\hat{U}(p_i - e\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{r}))\hat{U}^{-1} \\ &= \left[\boldsymbol{p} + \frac{e}{2}\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{B}}(0)\right]^2 \end{aligned} \tag{2.11}$$

となる．(2.11)の右辺は，さらに次のように変形される．

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{p} + \frac{e}{2}(\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{B}}(0))\right]^2 \\ &\quad = \frac{1}{2m}\left\{\boldsymbol{p}^2 + \frac{e}{2}(\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{B}}(0))\cdot\boldsymbol{p} + \frac{e}{2}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{B}}(0)) + \frac{e^2}{4}(\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{B}}(0))^2\right\}.\end{aligned}$$

ここで右辺の第2項と第3項を成分に分解すれば，

$$(\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{B}}(0))\cdot\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{B}}(0))$$

であることが確かめられる．また

$$\begin{aligned}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r} \times \hat{\boldsymbol{B}}(0)) &= \hat{\boldsymbol{B}}(0)\cdot(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{r}) = -(\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p})\cdot\hat{\boldsymbol{B}}(0) \\ &= -\boldsymbol{L}\cdot\hat{\boldsymbol{B}}(0)\end{aligned}$$

である．ここで $\boldsymbol{L}$ は，電子の原点Oのまわりの軌道角運動量である．したがって

$$\frac{1}{2m}\left[\boldsymbol{p}+\frac{e}{2}(\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{B}}(0))\right]^2=\frac{1}{2m}\boldsymbol{p}^2-\frac{e}{2m}\boldsymbol{L}\cdot\hat{\boldsymbol{B}}(0)+\frac{e^2}{8m}(\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{B}}(0))^2. \quad (2.12)$$

次に(2.1)の右辺の第 2 項を変換する．(2.8)と同様に

$$\begin{aligned}&\hat{U}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}\hat{U}^{-1}\\&=\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}+\left(\frac{-ie}{\hbar}\right)\left[\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r}),\ \sum_{\boldsymbol{k},\lambda}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}\right]\\&\quad+\frac{1}{2!}\left(\frac{-ie}{\hbar}\right)^2\left[\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r}),\left[\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r}),\ \sum_{\boldsymbol{k},\lambda}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}\right]\right]+\cdots \qquad (2.13)\end{aligned}$$

と展開する．ここで，(1.44)の Fourier 展開より

$$\begin{aligned}\hat{A}_l^{(\mathrm{C})}(0)&=\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}}e_l^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}+\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}],\\\frac{\partial\hat{A}_l^{(\mathrm{C})}}{\partial x_m}(0)&=\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}}e_l^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})ik_m[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}-\hat{a}_{k}^{(\lambda)\dagger}], \qquad (2.14)\\\frac{\partial\hat{E}_{\perp,l}}{\partial x_m}(0)&=-\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0L^3}}e_l^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})k_m[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}+\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}]\end{aligned}$$

であることを用いると

$$\begin{aligned}\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r})=\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}}\Big[&e_l^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})x_l(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}+\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger})\\&+\frac{i}{2}x_lx_me_l^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})k_m(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}-\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger})\Big] \qquad (2.15)\end{aligned}$$

と表わされる．これを用いると，(2.13)の右辺の第 2 項は

$$\begin{aligned}&\left(-\frac{ie}{\hbar}\right)\left[\hat{\Lambda}(\boldsymbol{r}),\ \sum_{\boldsymbol{k},\lambda}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}\right]\\&=-ie\sum_{\boldsymbol{k},\lambda}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0L^3}}\Big[e_l^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})x_l(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}-\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger})\\&\qquad+\frac{i}{2}x_lx_me_l^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})k_m(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}+\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger})\Big]\\&=-ex_l\hat{E}_{\perp,l}(0)-\frac{e}{2}x_lx_m\frac{\partial\hat{E}_{\perp,l}}{\partial x_m}(0) \qquad (2.16)\end{aligned}$$

となる．一方，古典電磁気学によると，点電荷 e の電気 4 重極モーメントは

$$Q_{l,m}=e[x_lx_m-(1/3)\boldsymbol{r}^2\delta_{l,m}] \qquad (2.17)$$

で定義される．すると，

$$Q_{l,m}\frac{\partial\hat{E}_{\perp,l}}{\partial x_m}(0) = ex_l x_m\frac{\partial\hat{E}_{\perp,l}}{\partial x_m}(0)-\frac{1}{3}e\boldsymbol{r}^2\delta_{l,m}\frac{\partial\hat{E}_{\perp,l}}{\partial x_m}(0)$$
$$= ex_l x_m\frac{\partial\hat{E}_{\perp,l}}{\partial x_m}(0)-\frac{1}{3}e\boldsymbol{r}^2\frac{\partial\hat{E}_{\perp,l}}{\partial x_l}(0)$$

である．ここで(1.31)より $\partial\hat{E}_{\perp,l}/\partial x_l=\mathrm{div}\,\hat{\boldsymbol{E}}_\perp=0$ であることに注意すると，(2.13)の右辺において，

$$第2項 = -ex_l\hat{E}_{\perp,l}(0)-\frac{1}{2}Q_{l,m}\frac{\partial\hat{E}_{\perp,l}}{\partial x_m}(0) \tag{2.18}$$

と表わされる．(2.13)の右辺の第3項に(2.18)を代入すると，やや長い計算ののちに

$$第3項 = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}(\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r})^2\left[1+\frac{1}{4}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})^2\right] \tag{2.19}$$

をえる．これは発散する c 数である．したがって，(2.13)の右辺の第4項以下は0である．

以上の結果をまとめると，変換されたハミルトニアンは

$$\begin{aligned}\hat{H}' &= \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}\\ &= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle+V(\boldsymbol{r})\right]+\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}+1/2]\\ &\quad -e\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{E}}_\perp(0)-\frac{e}{2m}\boldsymbol{L}\cdot\hat{\boldsymbol{B}}(0)\\ &\quad -\frac{1}{2}Q_{l,m}\frac{\partial\hat{E}_{\perp,l}}{\partial x_m}(0)+\frac{e^2}{8m}(\boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{B}}(0))^2\\ &\quad +\frac{e^2}{2\varepsilon_0 L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}(\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r})^2\left[1+\frac{1}{4}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})^2\right]\end{aligned} \tag{2.20}$$

で与えられる．

第5章でよく利用した**電気双極子近似**の相互作用は，(2.20)の右辺の第3項だけを残したものである．このとき，ハミルトニアン(1.51)では，電気双極子近似に寄与する相互作用が $\hat{\boldsymbol{A}}^{(C)}$ の1次の項とその2次の項の二つの項であったのに対し，(2.20)では $-e\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{E}}_\perp(0)$ の一つの項だけであることに注意しよう．(2.20)の第4項は**磁気双極子近似**の相互作用を，第5項は**電気4重極近似**での相互作用を表わしている．第6項は，磁場の2次を含むので，たいていの場

合，これは無視できる．最後の第7項は，(1.33)の最後に現われたCoulomb力による自己エネルギー $e^2/8\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}|$ とともに発散する量であり，これらは，原点Oにおけるデルタ関数的な相互作用を与える*．ここで，(2.20)に現われた各種の相互作用の大きさの程度を評価しておこう．原子の大きさをBohr半径 $a_0=\lambda\!\!\!^{-}_{\rm c}/\alpha$ の程度であるとし，$(\partial E_{\perp,l}/\partial x_m)(0)\sim kE_\perp\sim(\omega_0/c)E_\perp(0)$ と近似する．ここで $\hbar\omega_0\sim E_{\rm Ryd}=mc^2\alpha^2/2$ である．このとき

$$
\begin{aligned}
H_{\rm e.d.} &= -e\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{E}_\perp(0)\sim ea_0E_\perp(0)\sim e(\lambda\!\!\!^{-}_{\rm c}/\alpha)E_\perp(0),\\
H_{\rm e.q.} &= -\frac{1}{2}Q_{l,m}(\partial E_{\perp,l}/\partial x_m)(0)\sim ea_0{}^2(\omega_0/c)E_\perp(0)\\
&\sim e(\lambda\!\!\!^{-}_{\rm c}/\alpha)^2\cdot(mc/\hbar)\cdot\alpha^2E_\perp(0)\sim e\lambda\!\!\!^{-}_{\rm c}E_\perp(0),\\
H_{\rm m.d.} &= -\frac{e}{2m}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{B}(0)\sim\frac{e}{m}\hbar\cdot E_\perp(0)/c\sim e\lambda\!\!\!^{-}_{\rm c}E_\perp(0)
\end{aligned}
$$

である．したがって，これらの相互作用の大きさの比は大よそ

$$H_{\rm e.d.}:H_{\rm e.q.}:H_{\rm m.d.}\cong\alpha^{-1}:1:1$$

で与えられる．すなわち，電気双極子近似の相互作用は他の相互作用に比べて，137倍の程度も大きい．そこで以下では，電気双極子近似以外の相互作用を無視することにしよう．このとき，相互作用ハミルトニアンは

$$\hat{H}_{\rm e.d.}=-e\boldsymbol{r}\cdot\hat{\boldsymbol{E}}_\perp(0)=-ie\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0L^3}}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}-\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}] \tag{2.21}$$

で与えられる．

---

*　Coulombの自己エネルギーを次のように計算する．

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}\cdot\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}|}&=\frac{e^2}{2\varepsilon_0}\frac{1}{L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{e^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r})}}{k^2}\cong\frac{e^2}{2\varepsilon_0L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{(1+i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})(1-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})}{k^2}\\
&=\frac{e^2}{2\varepsilon_0L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{1}{k^2}+\frac{e^2}{2\varepsilon_0L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r})}{k^2}={\rm const.}+\frac{e^2}{2\varepsilon_0L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{e}^{(3)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r})^2.
\end{aligned}
$$

ここで $\boldsymbol{e}^{(3)}(\boldsymbol{k})=\boldsymbol{k}/k$ を用いた．これを(2.20)の第7項に加えると

$$
\begin{aligned}
&{\rm const.}+\frac{e^2}{2\varepsilon_0L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1}^{3}(\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r})^2={\rm const.}+\frac{e^2}{2\varepsilon_0}x_lx_m\cdot\sum_{\lambda=1}^{3}e_l{}^{(\lambda)}e_m{}^{(\lambda)}\cdot\frac{1}{L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}1\\
&={\rm const.}+\frac{e^2}{2\varepsilon_0}x_lx_m\delta_{l,m}\delta^3(0)={\rm const.}+\frac{e^2}{2\varepsilon_0}\boldsymbol{r}^2\delta^3(0).
\end{aligned}
$$

このデルタ関数的な相互作用は，後に述べるLambシフトの原因の一部として寄与する．

§3　光子の放出と吸収

(1)　光子の放出

第5章§3では，古典的な外部電場の作用による原子の状態の転移確率を求めることにより，Einstein の B 係数を計算した．ここでは，電磁波を光子の集合とみて，原子による光の放出と吸収の問題を扱うことにする．そこでまず，204ページの図5.1において，はじめ原子は高エネルギー E_2 の状態にあり，これが光子を放出して低エネルギー準位 E_1 の状態に転移する過程を考える．このとき，原子内電子と光子の相互作用としては，(2.21)の電気双極子近似の相互作用を採用する．摂動の第1近似での単位時間当りの転移確率は，第5章(2.32)において $\mathrm{d}w_{f,i}=w_{f,i}\mathrm{d}\Omega_f$ と書くと

$$w_{f,i} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle f|\hat{H}_{\mathrm{e.d.}}|i\rangle|^2\rho_f \tag{3.1}$$

で与えられる．ここで ρ_f は，放出された光子の体積 L^3 当りの状態密度関数で，それは第5章(2.31)によって

$$\rho_f = (L/2\pi\hbar)^3 p_f{}^2\,\mathrm{d}p_f/\mathrm{d}E_f = (L/2\pi\hbar)^3\hbar^2\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2/c^3 \tag{3.2}$$

で与えられる．ここで $p_f=\hbar k$, $E_f=\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}=\hbar ck$ の関係を利用している．なお，(3.2)では放射される光子の偏りの方向に関する和はとっていないことに注意しよう．

原子の初状態を $|2\rangle$，終状態を $|1\rangle$ と書き，波数が $\boldsymbol{k}$ で，その偏りの方向が $\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ の光子が $n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ 個ある初状態を $|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}\rangle$，その光子の数が1個増えた終状態を $|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1\rangle$ と表わすと，(2.21)の行列要素は

$$\begin{aligned}\langle f|\hat{H}_{\mathrm{e.d.}}|i\rangle &= \langle n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1, 1|\hat{H}_{\mathrm{e.d.}}|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}, 2\rangle \\ &= +ie\langle 1|\hat{\boldsymbol{r}}|2\rangle\cdot\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0 L^3}}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\sqrt{n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1}\end{aligned}$$

で与えられる．このとき

$$\langle n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1|\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}\rangle = 0, \qquad \langle n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1|\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}\rangle = \sqrt{n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1}$$

を用いている．ここで $\boldsymbol{r}_{12}\equiv\langle 1|\hat{\boldsymbol{r}}|2\rangle$ とおくと

$$|\langle f|\hat{H}_{\mathrm{e.d.}}|i\rangle|^2 = e^2\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0 L^3}|\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|^2(n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1)$$

である．実際には，初状態の光子数には統計的なゆらぎがあるから，右辺の光子数 $n_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}$ をその統計的平均値 $\bar{n}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}$ でおきかえてよい．したがって，波数 $\boldsymbol{k}$ で偏りの方向が $\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ の光子が放出される単位時間当りの確率 $w_{f,i}{}^{(e)}$ は

$$w_{f,i}{}^{(e)} = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{e^2\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0 L^3}\right)|\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|^2(\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1)\cdot\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3\cdot\left(\frac{\hbar^2\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2}{c^3}\right)$$

$$= \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)\cdot\frac{\omega_{\boldsymbol{k}}{}^3}{2\pi c^2}|\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|^2(\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1) \tag{3.3}$$

で与えられる．(3.3)の右辺の $\bar{n}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}$ に比例する項は，はじめから存在する平均光子数 $\bar{n}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}$ に比例する項であり，これは光子の**誘導放射**を記述する．このとき，放射される光子は，入射光と同じ波数 $\boldsymbol{k}$ と偏り $\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ をもっていることに注意されたい．残りの1に比例する項は，はじめ光子が一つもないときにも放射される**自発放射**を表わしている．

そこでまず，誘導放射の部分を調べる．角振動数が $\omega_{\boldsymbol{k}}$ と $\omega_{\boldsymbol{k}}+\mathrm{d}\omega_{\boldsymbol{k}}$ の間にある光の平均エネルギー密度を $\bar{u}(\omega_{\boldsymbol{k}})$ とすると

$$\bar{u}(\omega_{\boldsymbol{k}})\mathrm{d}\omega_{\boldsymbol{k}} = \hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\,\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}\cdot\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\frac{(\hbar\omega_{\boldsymbol{k}})^2}{c^3}\mathrm{d}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}} \tag{3.4}$$

である．ここで右辺の $\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\,\bar{n}_{\boldsymbol{k}}^{(\lambda)}$ は光子群の平均エネルギーであり，残りの因子は，波数 $\boldsymbol{k}$，偏り λ をもつ光子のエネルギー幅 $\Delta\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}$ に含まれる単位体積中の状態数である．それは光子の単位体積当りの状態数は

$$\frac{\Delta n_x\Delta n_y\Delta n_z}{L^3} = \frac{1}{L^3}\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3\cdot\Delta^3 p = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^3\frac{(\hbar\omega_{\boldsymbol{k}})^2}{c^3}\Delta\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\,\Delta\Omega_{\boldsymbol{k}}$$

で与えられるからである．(3.4)より

$$\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)} = [(2\pi)^3c^3/\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}{}^3]\bar{u}(\omega_{\boldsymbol{k}}) \tag{3.5}$$

である．これを(3.3)の右辺の誘導放射の部分に代入すると

$$w_{f,i}{}^{(e)} = \frac{(2\pi)^3e^2}{8\pi^2\varepsilon_0\hbar^2}|\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|^2\bar{u}(\omega_{\boldsymbol{k}})$$

となる．ここで $\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})=|\boldsymbol{r}_{12}|\cdot|\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|\cos\theta=|\boldsymbol{r}_{12}|\cos\theta$ とおいて，$\boldsymbol{r}_{12}$ の方向について平均すると

$$\overline{|\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|^2} = (1/3)|\boldsymbol{r}_{12}|^2$$

となる．したがって，このとき

$$\bar{w}_{f,i}^{(e)} = \left(\frac{\pi e^2}{3\varepsilon_0\hbar^2}\right)|\boldsymbol{r}_{12}|^2\bar{u}(\omega_{\boldsymbol{k}}) \equiv B_{21}\bar{u}(\omega_{\boldsymbol{k}}) \tag{3.6}$$

となり，Einstein 係数として

$$B_{21} = (\pi e^2/3\varepsilon_0\hbar^2)|\boldsymbol{r}_{12}|^2 \tag{3.7}$$

がえられる．これは，第5章(3.17)に正確に一致している．

次に(3.3)の自発放射の項を調べよう．自発放射のときには，放出される光子はどのような方向にも放射され，また偏りの方向も制限されることはない．したがって，その単位時間当りの転移確率は

$$W_{f,i}^{(e)} = \sum_{\lambda=1,2}\int w_{f,i}^{(e)}\mathrm{d}\Omega_f = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)\cdot\frac{\omega_{\boldsymbol{k}}^3}{2\pi c^2}\sum_{\lambda=1,2}\int\mathrm{d}\Omega_f|\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|^2 \tag{3.8}$$

で与えられる．ここで

$$\begin{aligned}\sum_{\lambda=1,2}|\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|^2 &= \sum_{\lambda=1,2}(\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))(\boldsymbol{r}_{21}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))\\ &= \sum_{i,j}(r_{12})_i(r_{21})_j\sum_{\lambda=1,2}e_i^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})e_j^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\\ &= \sum_{i,j}(r_{12})_i(r_{21})_j[\delta_{i,j}-e_i^{(3)}(\boldsymbol{k})e_j^{(3)}(\boldsymbol{k})]\\ &= |\boldsymbol{r}_{12}|^2(1-\cos^2\theta) = |\boldsymbol{r}_{12}|^2\sin^2\theta\end{aligned} \tag{3.9}$$

である．3番目の等号では(1.24)の第2式をつかい，また4番目の等号では $\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(3)}(\boldsymbol{k})=|\boldsymbol{r}_{12}|\cos\theta$ とおいている．(3.9)を(3.8)に代入して，光子の進行方向 $\boldsymbol{e}^{(3)}(\boldsymbol{k})$ の方向の立体角 $\mathrm{d}\Omega_f$ について積分すると

$$\begin{aligned}W_{f,i}^{(e)} &= \frac{e^2\omega_{\boldsymbol{k}}^3}{8\pi^2\varepsilon_0\hbar c^3}|\boldsymbol{r}_{12}|^2\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\cdot\int_0^{\pi}\sin^2\theta\cdot\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\\ &= \frac{4}{3}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\frac{\omega_{\boldsymbol{k}}^3}{\hbar c^3}|\boldsymbol{r}_{12}|^2 = \frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}^3}{\pi^2c^3}B_{21}\end{aligned} \tag{3.10}$$

となる．これを第5章(3.9)と比較すると，(3.10)の $W_{f,i}^{(e)}$ は Einstein の A_{21} 係数そのものであることが分かる．

自発放射による単位時間当りの放射エネルギーは

$$S = \hbar\omega_{\boldsymbol{k}}W_{f,i}^{(e)} = \frac{4}{3}\cdot\frac{e^2\omega_{\boldsymbol{k}}^4}{4\pi\varepsilon_0c^3}|\boldsymbol{r}_{12}|^2 \tag{3.11}$$

で与えられる．ここで原子の固有状態の時間依存性を考えて，$\omega=(E_2-E_1)/\hbar$

とおくと

$$\boldsymbol{r}_{12}(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_1{}^*(\boldsymbol{r}, t)\boldsymbol{r}\psi_2(\boldsymbol{r}, t)\mathrm{d}^3r = \boldsymbol{r}_{12}\,\mathrm{e}^{i(E_1-E_2)t/\hbar} = \boldsymbol{r}_{12}\,\mathrm{e}^{-i\omega t} \quad (3.12)$$

である．すでに第2章(5.37)で説明したように，量子力学では，体系の構造にかかわりなく，エネルギー表示をとったとき，すべての力学量は(3.12)のような振動的なふるまいをする．一方，古典論で原子の振動子モデルを考えると，それから放射される電磁波の単位時間当りの放射エネルギーは

$$S_c = \frac{2}{3}\left(\frac{e^2\omega^4}{4\pi\varepsilon_0 c^2}\right)\overline{\boldsymbol{r}_c{}^2(t)} = \frac{1}{3}\left(\frac{e^2\omega^4}{4\pi\varepsilon_0 c^3}\right)\boldsymbol{r}_0{}^2 \quad (3.13)$$

で与えられる*．ここで $\boldsymbol{r}_c(t)=\boldsymbol{r}_0\cos\omega t$ とし，$\overline{\boldsymbol{r}_c{}^2(t)}$ は振動子の1周期当りの平均値である．(3.11)と(3.13)を比較すると，4の因子だけが違っている．この相違の原因は

$$\boldsymbol{r}_c(t) = (1/2)\boldsymbol{r}_0(\mathrm{e}^{i\omega t}+\mathrm{e}^{-i\omega t})$$

と表わして，これを(3.12)と比較すると，$\boldsymbol{r}_0/2$ が(3.12)の $\boldsymbol{r}_{12}$ に対応する．そこで(3.13)で $\boldsymbol{r}_0=2\boldsymbol{r}_{12}$ とおくと，(3.13)の古典論の結果は，(3.11)の量子力学による結果と完全に一致する．

ここで，(3.10)の自発放射の単位時間当りの転移確率の大きさの程度を調べておこう．$|\boldsymbol{r}_{12}|\sim a_0$ の程度とみると

$$A_{21} = W_{f,i}{}^{(e)} = \frac{4}{3}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)\left(\frac{\omega^3}{c^2}\right)a_0{}^2 = \frac{4}{3}\alpha\frac{(\omega\tau)^3}{\tau}$$

と表わされる．ここで $\tau\equiv a_0/c\cong 2\times10^{-19}$ s は，光が Bohr 半径 a_0 を通過するのに要する時間であり，この時間は原子的世界での時間の単位の一つと解釈される．放射される光が可視光(黄)のとき，その角振動数の値は $\omega\cong3.4\times10^{15}$ s^{-1} の程度であるから，$\omega\tau\cong7\times10^{-4}$ である．これらの数値を用いると，上の A_{21} の値は

$$A_{21} \cong (4/3)\times(1/137)\times(7\times10^{-4})^3\div(2\times10^{-19}) \cong 1.7\times10^7\ \mathrm{s}^{-1}$$

の程度の大きさである．したがって原子の励起状態の平均寿命の長さは $1/A_{21}\cong6.0\times10^{-8}$ s の程度である．単位時間当りの転移確率 A_{21} が1よりも大きい

---

*　砂川重信「電磁気学」岩波書店(1987)，p. 309，(3.10)式を参照．

というのは，一見不合理のようにみえるが，これは1秒間という時間が原子的世界の時間単位 τ と比較したときに長すぎるからである．事実，τ 秒間当りの転移確率は $A_{21}\tau \cong 3\times 10^{-12}$ で，これは，摂動近似が正しいことを示している．

（2）光子の吸収

次に，はじめ原子が低エネルギーの準位 E_1 にあり，また波数 $\boldsymbol{k}$ で，偏りの方向が $\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ の光子が $n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ 個あったとし，そのうちの1個の光子が原子に吸収されて，原子は高エネルギー E_2 の状態に転移する場合を考える．このときには，(3.1)の行列要素は

$$\langle n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}-1, 2|\hat{H}_{\mathrm{e.d.}}|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}, 1\rangle = -ie(\boldsymbol{r}_{21}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0 L^3}}\sqrt{n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}}$$

で与えられる．ここでもはじめの光子数のゆらぎを考えて，$n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ を平均入射光子数 $\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ でおきかえると，単位時間当りの光子の吸収確率 $w_{f,i}{}^{(a)}$ は

$$\begin{aligned} w_{f,i}{}^{(a)} &= \frac{2\pi}{\hbar}\cdot\frac{e^2\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0 L^3}|\boldsymbol{r}_{21}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|^2\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}\rho_i \\ &= \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)\cdot\left(\frac{\omega_{\boldsymbol{k}}{}^3}{2\pi c^2}\right)|\boldsymbol{r}_{21}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|^2\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)} \end{aligned} \tag{3.14}$$

で与えられる．ここで ρ_i は体積 L^3 当りの入射光子の状態数であり，

$$\rho_i = \left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3\frac{(\hbar\omega_{\boldsymbol{k}})^2}{c^3}$$

である．このときも，光子の偏りの方向に関する和はとっていない．ここで(3.5)の関係を用い，また原子の方向に関して平均すると，

$$\bar{w}_{f,i}{}^{(a)} = \frac{\pi e^2}{\varepsilon_0\hbar^2}\cdot\frac{1}{3}|\boldsymbol{r}_{21}|^2\bar{u}(\omega_{\boldsymbol{k}}) = B_{12}\bar{u}(\omega_{\boldsymbol{k}}) \tag{3.15}$$

がえられる．

(3.3)と(3.14)の比をとると

$$w_{f,i}{}^{(e)}/w_{f,i}{}^{(a)} = (\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1)/\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)} \tag{3.16}$$

である．一方，状態1と状態2にある原子数は，それぞれBoltzmannの統計因子 $\exp(-\beta E_1)$ と $\exp(-\beta E_2)$ に比例するから，原子系と光子系が熱平衡状態にあるとき

$$w_{f,i}{}^{(a)}\mathrm{e}^{-\beta E_1} = w_{f,i}{}^{(e)}\mathrm{e}^{-\beta E_2} \tag{3.17}$$

の関係が成立する．(3.16)と(3.17)より，平衡状態における光子数の平均値は

$$\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}-1}$$

で与えられる．ここで $\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}=E_2-E_1$ である．これに $\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}$ と第5章(3.3)に与えた単位体積当りの状態数 $\mathrm{d}N/L^3$ を掛けると，Planck の公式

$$\bar{u}(\omega_{\boldsymbol{k}}) = \left(\frac{\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2}{\pi^2c^3}\right)\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}\cdot\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)} = \frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}{}^3}{\pi^2c^3}\cdot\frac{1}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}-1} \qquad (3.18)$$

がえられる．ここで2番目の表式のはじめの光子の状態数 $\mathrm{d}N/L^3=(\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2/\pi^2c^3)$ は，(3.4)のときとちがって光子の方向と偏りについての和をとったものであることに注意しよう．

問67　ハミルトニアン(1.51)の第2項と第3項において電気双極子近似をとると

$$\hat{H}_{\mathrm{e.d.}} = -\frac{e}{m}\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\boldsymbol{p}+\frac{e^2}{2m}(\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0))^2$$

となる．この相互作用を用いて，原子からの光子の単位時間当りの放出確率を求め，その結果が(3.3)と一致することを確かめよ．

§4　原子による光の散乱

原子の構造を探る重要な方法の一つは，原子による光の散乱を調べることである．したがってこの問題は，量子力学が形成される以前から重要な課題であった．ここでは，原点Oにおかれた原子核のまわりの電子による光子の散乱の問題を，電気双極子近似にもとづいて考える．この系のハミルトニアンは

$$\hat{H} = \hat{H}_0+\hat{H}_{\mathrm{e.d.}}, \qquad (4.1)$$

$$\hat{H}_0 = \left[\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2+V(\hat{\boldsymbol{r}})\right]+\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1/2] \qquad (4.2)$$

および

$$\hat{H}_{\mathrm{e.d.}} = -ie\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0L^3}}(\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}-\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}) \qquad (4.3)$$

で与えられる．

ここで，状態 i にある原子に運動量 $\hbar\boldsymbol{k}_i$ の光子が衝突して，原子の状態を f に変えて，光子は運動量 $\hbar\boldsymbol{k}_f$ をもって散乱される過程を考える．このとき初

状態は，(4.2)の $\hat{H}_0$ の固有状態として

$$\hat{H}_0|\boldsymbol{k}_i, i\rangle = E_i|\boldsymbol{k}_i, i\rangle, \qquad E_i = \mathcal{E}_i+\hbar\omega_i \tag{4.4}$$

で記述される．ここで $|\boldsymbol{k}_i, i\rangle=|\boldsymbol{k}_i\rangle|i\rangle$ である．状態ベクトル $|\boldsymbol{k}_i\rangle$ は，エネルギー $\hbar\omega_i$，運動量 $\hbar\boldsymbol{k}_i$ で，偏り $\boldsymbol{e}^{(i)}$ の光子が1個存在する状態を表わし，また $|i\rangle$ は，エネルギー固有値 $\mathcal{E}_i$ に属する原子内電子の固有ベクトルである．終状態もまた，$\hat{H}_0$ の固有状態として $|\boldsymbol{k}_f, f\rangle$ と表わされる．なお，散乱の中間状態では，光子が1個も存在しない状態が現われるので，その状態を $|0, \boldsymbol{n}\rangle$，また光子が2個ある状態は $|\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}_j, \boldsymbol{n}\rangle$ などと表現することにする．

散乱過程を記述する第7章(2.9)の $\hat{T}$ 演算子は

$$\hat{T} = \hat{H}_{\text{e.d.}}+\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0\hat{H}_{\text{e.d.}}+\cdots \tag{4.5}$$

と展開される．ここで $\hat{G}_0=1/[E_i-\hat{H}_0+i\varepsilon]$ である．(4.5)の右辺の第1項の行列要素をとると

$$\langle\boldsymbol{k}_f, f|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i, i\rangle = 0 \tag{4.6}$$

である．なぜなら，(4.3)の相互作用 $\hat{H}_{\text{e.d.}}$ は，それを初状態 $|\boldsymbol{k}_i, i\rangle$ に掛けると，光子の数を1個増減させて光子数が0個あるいは2個の状態をつくり，その状態は光子数が1個の終状態と直交するからである．そこで，(4.5)の右辺の第2項の効果を考える．このとき(4.5)の行列要素は

$$\langle\boldsymbol{k}_f, f|\hat{T}(E_i)|\boldsymbol{k}_i, i\rangle \cong \sum_n \frac{\langle\boldsymbol{k}_f, f|\hat{H}_{\text{e.d.}}|I_n\rangle\langle I_n|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i, i\rangle}{E_i-E_n+i\varepsilon} \tag{4.7}$$

で与えられる．ここで中間状態として，$\hat{H}_0$ のエネルギー固有値 E_n に属する固有状態 $|I_n\rangle$ の完全系を挿入した．図8.1からも分かるように，中間状態として生き残るのは，状態 $|i\rangle$ の原子が光子 $\hbar\boldsymbol{k}_i$ を吸収して状態 $|\boldsymbol{n}\rangle$ に転移する過程と，さきに光子 $\hbar\boldsymbol{k}_f$ を放出して2個の光子が現われる過程の二つの状態だけである．図8.1(a)のときには，$E_n=\mathcal{E}_n$ であり，図8.1(b)のときには，$E_n=\mathcal{E}_n+\hbar\omega_i+\hbar\omega_f$ である．したがって，(4.7)の行列要素は

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{k}_f, f|\hat{T}(E_i)|\boldsymbol{k}_i, i\rangle = &\sum_n \frac{\langle\boldsymbol{k}_f, f|\hat{H}_{\text{e.d.}}|0, n\rangle\langle 0, n|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i, i\rangle}{(\mathcal{E}_i-\mathcal{E}_n)+\hbar\omega_i} \\ &+\sum_n \frac{\langle\boldsymbol{k}_f, f|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}_f, n\rangle\langle\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}_f, n|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i, i\rangle}{(\mathcal{E}_i-\mathcal{E}_n)-\hbar\omega_f}\end{aligned} \tag{4.8}$$

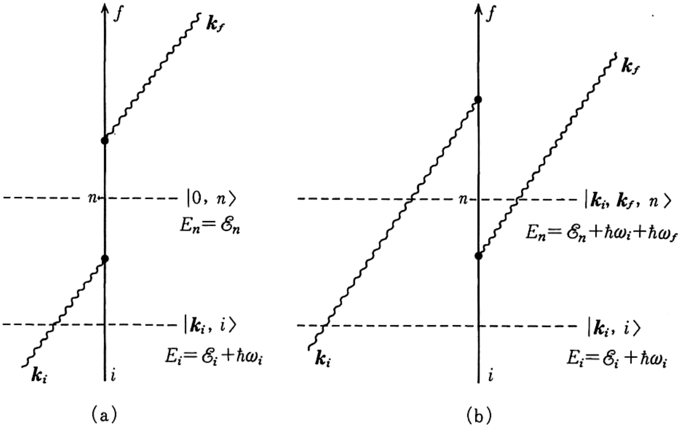


図 8.1　光子の原子による散乱

で与えられる．なお，(4.8)の右辺の分母には零点はないので，(4.7)の分母の $i\varepsilon$ は 0 としてよい．

ここで，(4.8)の右辺の行列要素は(4.3)の相互作用ハミルトニアンを用いて，次のように計算される．すなわち

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{k}_f, f|\hat{H}_{\mathrm{e.d.}}|0, n\rangle &= ie\sum_{\boldsymbol{k},\lambda}\sqrt{\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0 L^3}}\langle \boldsymbol{k}_f, f|(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}|0, n\rangle \\ &= ie\sqrt{\frac{\hbar\omega_f}{2\varepsilon_0 L^3}}\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{fn}, \\ \langle 0, n|\hat{H}_{\mathrm{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i, i\rangle &= -ie\sqrt{\frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3}}\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni},\end{aligned} \tag{4.9}$$

また

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{k}_f, f|\hat{H}_{\mathrm{e.d.}}|\boldsymbol{k}_f, \boldsymbol{k}_i, n\rangle &= -ie\sqrt{\frac{\hbar\omega_i}{2\varepsilon_0 L^3}}\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{fn}, \\ \langle \boldsymbol{k}_f, \boldsymbol{k}_i, n|\hat{H}_{\mathrm{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i, i\rangle &= +ie\sqrt{\frac{\hbar\omega_f}{2\varepsilon_0 L^3}}\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni}\end{aligned} \tag{4.10}$$

である．ここで $\boldsymbol{e}^{(i)}$ と $\boldsymbol{e}^{(f)}$ は，それぞれ初状態と終状態の光子の偏りの方向の単位ベクトルであり，また

$$\boldsymbol{r}_{fn} = \langle f|\hat{\boldsymbol{r}}|n\rangle, \qquad \boldsymbol{r}_{ni} = \langle n|\hat{\boldsymbol{r}}|i\rangle$$

である．(4.9)と(4.10)を(4.8)に代入すると

$$\langle \boldsymbol{k}_f, f\,|\,\hat{T}(E_i)\,|\,\boldsymbol{k}_i, i\rangle = \frac{e^2}{2\varepsilon_0 L^3}\sqrt{\hbar\omega_i\cdot\hbar\omega_f} \times \sum_n \left[\frac{(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{fn})(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})}{(\mathcal{E}_i-\mathcal{E}_n)+\hbar\omega_i} + \frac{(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{fn})(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})}{(\mathcal{E}_i-\mathcal{E}_n)-\hbar\omega_f}\right] \qquad (4.11)$$

をえる．したがって，終状態の光子が立体角 $\mathrm{d}\Omega_f$ のなかに散乱される単位時間当りの確率は

$$w_{f,i}\mathrm{d}\Omega_f = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{\boldsymbol{k}_f, f}\frac{e^4\hbar\omega_i\cdot\hbar\omega_f}{(2\varepsilon_0 L^3)^2}\delta(\mathcal{E}_f+\hbar\omega_f-\mathcal{E}_i-\hbar\omega_i) \times \left|\sum_n \left[\frac{(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{fn})(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})}{(\mathcal{E}_i-\mathcal{E}_n)+\hbar\omega_i} + \frac{(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{fn})(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})}{(\mathcal{E}_i-\mathcal{E}_n)-\hbar\omega_f}\right]\right|^2$$

で与えられる．ここで $\hbar\omega_{n,i}\equiv(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i)$ とおき，光子の終状態に関する和が

$$\sum_{\boldsymbol{k}_f} \longrightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3}\int_0^\infty k_f{}^2\mathrm{d}k_f\cdot\mathrm{d}\Omega_f = \frac{L^3}{(2\pi)^3}\int_0^\infty \frac{\omega_f{}^2}{c^3}\mathrm{d}\omega_f\cdot\mathrm{d}\Omega_f$$

となることに注意すると

$$w_{f,i}\mathrm{d}\Omega_f = \frac{2\pi}{\hbar^2}\cdot\frac{e^4\omega_i}{(2\varepsilon_0 L^3)^2}\cdot\frac{L^3}{(2\pi)^3}\sum_f\int_0^\infty\frac{\omega_f{}^3}{c^3}\mathrm{d}\omega_f\delta(\omega_i-\omega_f-\omega_{f,i}) \times \left|\sum_n\left[\frac{(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{fn})(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})}{\omega_i-\omega_{n,i}} - \frac{(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{fn})(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})}{\omega_f+\omega_{n,i}}\right]\right|^2\mathrm{d}\Omega_f$$

となる．いまの場合，光子は体積 L^3 の立方体のなかに 1 個存在するように規格化されているから，単位断面積の断面に垂直に毎秒入射してくる光子の数は (c/L^3) 個である．したがって，散乱の微分断面積は

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_f} = \frac{w_{f,i}}{(c/L^3)} = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2\cdot\sum_{\substack{f\\ \omega_i>\omega_{f,i}}}\frac{\omega_i(\omega_i-\omega_{f,i})^3}{c^2} \times \left|\sum_n\left[\frac{(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{fn})(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})}{\omega_i-\omega_{n,i}} - \frac{(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{fn})(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})}{\omega_f+\omega_{n,i}}\right]\right|^2 \qquad (4.12)$$

で与えられる．ここで(4.12)の右辺に残されている n と f に関する和は，原子の中間状態 $|n\rangle$ と，エネルギー保存則をみたす原子のいろいろな終状態 $|f\rangle$ に関する和である．また，和の $\omega_i>\omega_{f,i}$ の条件は，$\omega_f=\omega_i-\omega_{f,i}>0$ であることからくるものである．なお(4.12)では，初状態と終状態の光子の偏りの方向 $\boldsymbol{e}^{(i)}$ と $\boldsymbol{e}^{(f)}$ は固定していることに注意されたい．(4.12)は，Heisenberg が行

列力学を発見する直前に，Heisenberg と Kramers によって Bohr の対応原理にもとづいて導かれた結果に一致している．

(1) Thomson 散乱

ここで，原子の終状態 $|f\rangle$ が初状態 $|i\rangle$ に一致している弾性散乱のときを考える．このとき，$\omega_f=\omega_i-\omega_{f,i}$ において，$\omega_{f,i}=0$ であるから，(4.12)は

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_f}=\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2\cdot\frac{\omega_i{}^4}{c^2}\left|\sum_n\left[\frac{(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{in})(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})}{\omega_i-\omega_{n,i}}-\frac{(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{in})(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})}{\omega_i+\omega_{n,i}}\right]\right|^2 \tag{4.13}$$

となる．ここで $\hbar\omega_i\gg\hbar\omega_{n,i}$ と仮定する．すなわち，原子のエネルギー準位間のエネルギー差に比べて，入射光子のエネルギーが十分に大きいとする．このとき

$$\frac{1}{\omega_i-\omega_{n,i}}\cong\frac{1}{\omega_i}\left(1+\frac{\omega_{n,i}}{\omega_i}\right),\qquad \frac{1}{\omega_i+\omega_{n,i}}\cong\frac{1}{\omega_i}\left(1-\frac{\omega_{n,i}}{\omega_i}\right)$$

と近似し，また $\boldsymbol{r}_{in}=\boldsymbol{r}_{ni}$ であるとすると，上の展開の第1項からの寄与は，(4.13)の右辺の括弧のなかの第1項と第2項で相殺してしまう．したがってこのとき，(4.13)は

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_f}=\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2\cdot\frac{1}{c^2}\left|\sum_n\omega_{n,i}\{(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{in})(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})+(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{in})(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})\}\right|^2 \tag{4.14}$$

となる．ここで $\boldsymbol{r}=(x_1,x_2,x_3)$ と書くと，総和則

$$\sum_n\omega_{n,i}\{\langle i|x_l|n\rangle\langle n|x_m|i\rangle+\langle i|x_m|n\rangle\langle n|x_l|i\rangle\}=\frac{\hbar}{m}\delta_{l,m} \tag{4.15}$$

が成立する．これを **Thomas-Reiche-Kuhn の総和則**(問68)という．これを用いると，(4.14)の右辺の絶対値の中味は

$$\sum_{l,m}e_l{}^{(f)}e_m{}^{(i)}\cdot\frac{\hbar}{m}\delta_{l,m}=\frac{\hbar}{m}\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{e}^{(i)} \tag{4.16}$$

となる．これより，(4.14)は

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_f}=\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2\cdot\left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{e}^{(i)})^2=r_\mathrm{e}{}^2(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{e}^{(i)})^2 \tag{4.17}$$

となる．ここで $r_\mathrm{e}=e^2/4\pi\varepsilon_0 mc^2$ は古典電子半径である．

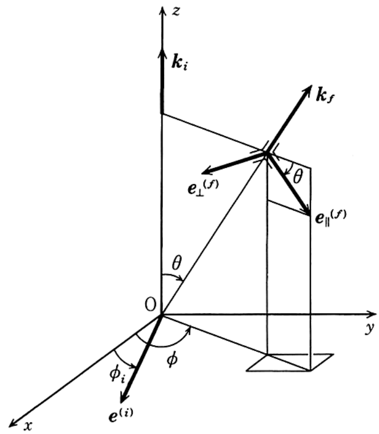


図 8.2　光子の偏りの方向

弾性散乱の微分断面積(4.17)を，入射波と散乱波の波数ベクトル $\boldsymbol{k}_i$ と $\boldsymbol{k}_f$ の間の角，すなわち $\boldsymbol{k}_f\cdot\boldsymbol{k}_i=k_i^2\cos\theta$ で定義される散乱角 θ で表わすことを考えよう．図 8.2 に示されているように，z 軸の方向を $\boldsymbol{k}_i$ の方向にとり，$\boldsymbol{k}_i$ と $\boldsymbol{k}_f$ のつくる平面内において $\boldsymbol{k}_f$ に垂直な方向に単位ベクトル $\boldsymbol{e}_\parallel{}^{(f)}$ をとり，その $\boldsymbol{e}_\parallel{}^{(f)}$ と $\boldsymbol{k}_f$ に垂直に単位ベクトル $\boldsymbol{e}_\perp{}^{(f)}$ をとる．すると，図 8.2 から

$$\boldsymbol{e}^{(i)}=(\cos\phi_i,\sin\phi_i,0),$$

$$\boldsymbol{e}_\perp{}^{(f)}=(\sin\phi,-\cos\phi,0),\qquad \boldsymbol{e}_\parallel{}^{(f)}=(\cos\theta\cos\phi,\cos\theta\sin\phi,-\sin\theta)$$

である．したがって，(4.17)の終状態の光子の偏りの方向について和をとると

$$\sum_f(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{e}^{(i)})^2=(\boldsymbol{e}_\parallel{}^{(f)}\cdot\boldsymbol{e}^{(i)})^2+(\boldsymbol{e}_\perp{}^{(f)}\cdot\boldsymbol{e}^{(i)})^2$$
$$=(\cos\phi_i\cos\theta\cos\phi+\sin\phi_i\cos\theta\sin\phi)^2+(\cos\phi_i\sin\phi-\sin\phi_i\cos\phi)^2$$

となる．また，初状態における光子の偏りの方向については平均をとると

$$\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos^2\phi_i\mathrm{d}\phi_i=\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\sin^2\phi_i\mathrm{d}\phi_i=\frac{1}{2},\qquad \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}\cos\phi_i\cdot\sin\phi_i\mathrm{d}\phi_i=0$$

より，

$$\overline{\sum_f(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{e}^{(i)})^2}=\frac{1}{2}(1+\cos^2\theta)$$

をえる．このとき，(4.17)は

$$\frac{\mathrm{d}\bar{\sigma}}{\mathrm{d}\Omega_f} = \frac{1}{2}r_e{}^2[1+\cos^2\theta] \tag{4.18}$$

となり，全断面積 $\bar{\sigma}$ は

$$\bar{\sigma} = \frac{1}{2}r_e{}^2\int_0^\pi[1+\cos^2\theta]\sin\theta\mathrm{d}\theta\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\phi = \frac{8}{3}\pi r_e{}^2 \tag{4.19}$$

で与えられる．(4.18)と(4.19)は，古典電磁気学における Thomson 散乱の断面積の公式にほかならない*．

問68　Thomas-Reiche-Kuhn の総和則(4.15)を証明せよ．

(2)　Rayleigh 散乱

次に弾性散乱ではあるが，入射光子のエネルギーが低く，$\hbar\omega_{n,i} \gg \hbar\omega_i$ のときを考えよう．この場合には，(4.13)の分母の ω_i を無視することができて

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_f} = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2\cdot\frac{\omega_i{}^4}{c^2}\left|\sum_n\frac{1}{\omega_{n,i}}[(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{in})(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})+(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{in})(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{ni})]\right|^2 \tag{4.20}$$

となる．ここで原子の初状態と終状態を水素原子の基底状態にとろう．このとき，第5章§4に与えた選択規則によって，位置演算子 $\hat{\boldsymbol{r}}$ の行列要素で0でないのは，s状態 ($l=0$; $m=0$) とp状態 ($l=1$; $m=0, \pm 1$) の間の行列要素だけである．なお，主量子数 n に関しては制限はない．水素原子の固有ベクトルを $|n,l,m\rangle$ と書くと

$$\langle 1,0,0|\hat{x}|n,1,0\rangle = \langle 1,0,0|\hat{y}|n,1,0\rangle = \langle 1,0,0|\hat{z}|n,1,\pm 1\rangle = 0$$

であり，また，第3章(4.23)の水素原子の固有関数を用いて角積分を行うことにより

$$\langle 1,0,0|\hat{x}|n,1,\pm 1\rangle = (1/\sqrt{2})\langle 1,0,0|\hat{z}|n,1,0\rangle,$$
$$\langle 1,0,0|\hat{y}|n,1,\pm 1\rangle = (1/\sqrt{2}\,i)\langle 1,0,0|\hat{z}|n,1,0\rangle$$

の関係が成立することが容易に確かめられる．そこで

$$\langle 0|\hat{z}|n\rangle \equiv \langle 1,0,0|\hat{z}|n,1,0\rangle$$

と書いて，上の関係を利用すると

＊　砂川重信「電磁気学演習」岩波書店(1987)，p.229を参照．

$$\sum_n \sum_{m=0,\pm 1} \omega_{n,0}^{-1}[(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{0n})(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{n0})+(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{0n})(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{n0})]$$

$$= \sum_n \omega_{n,0}^{-1}[2e_z^{(f)}e_z^{(i)}\langle 0|\hat{z}|n\rangle\langle n|\hat{z}|0\rangle$$

$$+\{(e_x^{(f)}-ie_y^{(f)})(e_x^{(i)}+ie_y^{(i)})+(e_x^{(i)}-ie_y^{(i)})(e_x^{(f)}+ie_y^{(f)})\}\langle 0|\hat{z}|n\rangle\langle n|\hat{z}|0\rangle]$$

$$= 2\hbar(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{e}^{(i)})\cdot\sum_n \frac{\langle 0|\hat{z}|n\rangle\langle n|\hat{z}|0\rangle}{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_0} \tag{4.21}$$

となる．ここで第5章の(1.29)と(1.30)を用いると

$$\sum_n \frac{\langle 0|\hat{z}|n\rangle\langle n|\hat{z}|0\rangle}{\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_0} = \frac{9}{4}\cdot\frac{m}{\hbar^2}\cdot a_0^4 \tag{4.22}$$

である．また，$E_{\mathrm{Ryd}}=\hbar^2/2ma_0^2$ を用い，$E_{\mathrm{Ryd}}=\hbar\omega_B$ と書いて a_0^2 を消去すると，(4.22)により(4.21)は

$$\frac{9}{8}\cdot\frac{\hbar}{m\omega_B^2}(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{e}^{(i)})$$

となる．これを(4.20)に代入すると

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega_f} = \left(\frac{81}{64}\right)\cdot\frac{\omega_i^4}{\omega_B^4}\cdot r_{\mathrm{e}}^2(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{e}^{(i)})^2 = \left(\frac{81}{64}\right)\left(\frac{\omega_i}{\omega_B}\right)^4\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{T}}}{\mathrm{d}\Omega_f} \tag{4.23}$$

をえる．ここで右辺の $\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{T}}/\mathrm{d}\Omega_f$ は(4.17)の Thomson 散乱の微分断面積である．(4.23)は，散乱断面積が入射光の角振動数 ω_i の4乗に比例する Rayleigh 散乱の断面積にほかならない．なお，古典論における原子の振動子模型では，Rayleigh 散乱の断面積 $\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{R}}/\mathrm{d}\Omega_f$ は

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{R}}}{\mathrm{d}\Omega_f} = \left(\frac{\omega_i}{\omega_0}\right)^4\frac{\mathrm{d}\sigma_{\mathrm{T}}}{\mathrm{d}\Omega_f}$$

で与えられる．ω_0 は振動子の固有角振動数である*．

(3) 共鳴散乱

Heisenberg-Kramers の公式(4.12)において，入射光子のエネルギー $\hbar\omega_i$ が $\hbar\omega_{n,i}$ のうちの一つ $\hbar\omega_{r,i}$ に近づくと，その項からの寄与だけが大きくなり，他の項は無視することができる．これを**共鳴散乱**という．ここでも弾性散乱を考えると，共鳴散乱の場合には(4.12)は

* 前ページの脚注を参照．

$$\frac{d\sigma_r}{d\Omega_f}=\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2\cdot\frac{\hbar^2\omega_i{}^4}{c^2}\left|\frac{(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{ir})(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{ri})}{(\hbar\omega_i+\mathcal{E}_i)-\mathcal{E}_r}\right|^2 \tag{4.24}$$

と表わされる．(4.24)をみると，$\hbar\omega_i$ が正確に $(\mathcal{E}_r-\mathcal{E}_i)$ に等しいとき，散乱断面積は無限大になってしまう．このようなことは物理的にありえない．この欠陥を除くには，(4.5)の展開式の高次の項からの寄与を考慮しなければならない．

散乱の演算子 $\hat{T}$ のみたす積分方程式は

$$\hat{T}=\hat{H}_{\text{e.d.}}+\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0\hat{T} \tag{4.25}$$

で与えられる．この方程式の形式解は

$$\hat{T}=\frac{1}{1-\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0}\cdot\hat{H}_{\text{e.d.}}$$

である．これを(4.25)の右辺に代入すると

$$\hat{T}=\hat{H}_{\text{e.d.}}+\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0\frac{1}{1-\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0}\hat{H}_{\text{e.d.}} \tag{4.26}$$

となる．(4.26)の弾性散乱に対応する行列要素をとり，中間状態として，光子の数が0で，原子が状態 r にあるものだけを残すと，

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{k}_f,i|\hat{T}|\boldsymbol{k}_i,i\rangle &\cong \langle\boldsymbol{k}_f,i|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i,i\rangle\\ &+\langle\boldsymbol{k}_f,i|\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle\frac{1}{E_i-\mathcal{E}_r+i\varepsilon}\langle 0,r|\frac{1}{1-\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0}|0,r\rangle\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i,i\rangle\end{aligned} \tag{4.27}$$

をえる．(4.6)により，(4.27)の右辺の第1項は消える．ここでさらに，次の近似をする．

$$\begin{aligned}\langle 0,r|\frac{1}{1-\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0}|0,r\rangle &= \langle 0,r|[1+\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0+\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0+\cdots]|0,r\rangle\\ &\cong 1+\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle\frac{1}{E_i-\mathcal{E}_r+i\varepsilon}\\ &\quad+\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle\frac{1}{E_i-\mathcal{E}_r+i\varepsilon}\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle\frac{1}{E_i-\mathcal{E}_r+i\varepsilon}\\ &\quad+\cdots\cdots.\end{aligned} \tag{4.28}$$

ここで，$\hat{H}_{\text{e.d.}}$ は $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ と $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}$ を1個しか含まないため，$\hat{H}_{\text{e.d.}}$ を奇数個ふくむ項からの寄与は0であることを用いている．(4.28)の展開式をまとめると

$$\langle 0,r|\frac{1}{1-\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0}|0,r\rangle = \left[1-\frac{1}{E_i-\mathcal{E}_r+i\varepsilon}\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle\right]^{-1}$$

となる．これを(4.27)の右辺に代入すると

$$\langle \boldsymbol{k}_f,i|\hat{T}|\boldsymbol{k}_i,i\rangle = \frac{\langle \boldsymbol{k}_f,i|\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i,i\rangle}{E_i-\mathcal{E}_r-\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle+i\varepsilon} \qquad (4.29)$$

である．

さて，$E_i=\mathcal{E}_i+\hbar\omega_i\cong\mathcal{E}_r$ のとき

$$\begin{aligned}\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0(E_i)\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle &\cong \langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0(\mathcal{E}_r)\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle \\ &= \langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}\mathrm{P}\frac{1}{\mathcal{E}_r-\hat{H}_0}\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle - i\pi\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}\delta(\mathcal{E}_r-\hat{H}_0)\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle \\ &= \sum_n \mathrm{P}\frac{|\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_n,n\rangle|^2}{\mathcal{E}_r-E_n} - i\pi\sum_n \delta(\mathcal{E}_r-E_n)|\langle \boldsymbol{k}_n,n|\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle|^2 \end{aligned} \qquad (4.30)$$

と表わされる．ここで 2 番目の等号では，第 2 章(1.31)を用いた．(4.30)の最後の表式の第 2 項

$$W_r = \sum_n w_{n,r} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_n \delta(E_n-\mathcal{E}_r)|\langle \boldsymbol{k}_n,n|\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle|^2 \qquad (4.31)$$

は，共鳴状態 $|0,r\rangle$ から波数 $\boldsymbol{k}_n$ の光子を 1 個放出して，原子は状態 $|n\rangle$ に転移するときの単位時間当りの全確率である．また，(4.30)の右辺の第 1 項は，次に述べる Lamb シフト，すなわち共鳴状態にある原子のエネルギー準位のずれ

$$\Delta\mathcal{E}_r = \sum_n \mathrm{P}\frac{\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_n,n\rangle\langle \boldsymbol{k}_n,n|\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle}{\mathcal{E}_r-E_n} \qquad (4.32)$$

を与える．そこで，$\Gamma_r=\hbar W_r$ とおくと，(4.30)は

$$\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}\hat{G}_0\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle = \Delta\mathcal{E}_r - i(1/2)\Gamma_r \qquad (4.33)$$

と表わされる．これを(4.29)に代入すると

$$\langle \boldsymbol{k}_f,i|\hat{T}|\boldsymbol{k}_i,i\rangle = \frac{\langle \boldsymbol{k}_f,i|\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle\langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i,i\rangle}{E_i-(\mathcal{E}_r+\Delta\mathcal{E}_r)+i\Gamma_r(\mathcal{E}_r)/2}$$

となる．ここで

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{k}_f,i|\hat{H}_{\text{e.d.}}|0,r\rangle &= +ie(\boldsymbol{r}_{ir}\cdot\boldsymbol{e}^{(f)})\sqrt{\hbar\omega_f/2\varepsilon_0 L^3}, \\ \langle 0,r|\hat{H}_{\text{e.d.}}|\boldsymbol{k}_i,i\rangle &= -ie(\boldsymbol{r}_{ri}\cdot\boldsymbol{e}^{(i)})\sqrt{\hbar\omega_i/2\varepsilon_0 L^3}\end{aligned}$$

であり，また

$$E_i-(\mathcal{E}_r+\Delta\mathcal{E}_r)=\mathcal{E}_i+\hbar\omega_i-\mathcal{E}_r-\Delta\mathcal{E}_r=\hbar\omega_i-\hbar\omega'_{r,i}\ ;$$

$$\hbar\omega'_{r,i}=(\mathcal{E}_r+\Delta\mathcal{E}_r)-\mathcal{E}_i$$

とおくと，共鳴散乱の微分断面積は

$$\frac{\mathrm{d}\sigma_r}{\mathrm{d}\Omega_f}=\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2\cdot\frac{\omega_i{}^4}{c^2}\cdot\frac{(\boldsymbol{e}^{(f)}\cdot\boldsymbol{r}_{ir})^2(\boldsymbol{e}^{(i)}\cdot\boldsymbol{r}_{ri})^2}{(\omega_i-\omega'_{r,i})^2+\Gamma_r{}^2(\mathcal{E}_r)/4\hbar^2}\qquad(4.34)$$

で与えられる．これは，(4.24)と違って，$\omega_i=\omega'_{r,i}$ のときにも発散することはない．なお，(4.34)では入射光と散乱光の偏りの方向 $\boldsymbol{e}^{(i)}$ と $\boldsymbol{e}^{(f)}$ は固定している．

§5　Lamb シフト

これまでもなんどか経験したことであるが，量子化された電磁場の理論には，ある物理量を計算するとその値が無限大になるという困難が内蔵されている．これは，電磁場の自由度が無限大であることからくる困難であり，この問題は現在でも解決されていない*．この困難が現われる一つの例が，電子の自己エネルギーの問題である．電荷をもつ電子のまわりには，つねに電磁場がまとわりついている．その電磁場と電子との相互作用によって生じる電子のエネルギーのずれを電子の**自己エネルギー**という．この自己エネルギーを計算すると，その値が無限大になってしまうのである．第3章§4で述べたように，水素原子の 2s 状態 ($n=2$, $l=0$) と 2p 状態 ($n=2$, $l=1$) のエネルギー固有値は縮退している．この事情は，Dirac の相対論的な電子の波動方程式を用いたときでも変わらない．

1947年，Lamb と Retherford は，これらの状態の間のエネルギー差を精密に測定して，2s 状態は 2p 状態よりも，約 1040 MHz ほど高いエネルギー準位にあることを発見した．これを **Lamb シフト**という．Bethe は，このエネルギー差は，それぞれ無限大の値で与えられる自由電子の自己エネルギーと束縛状態の自己エネルギーの差からくるものと考えて，Lamb シフトの説明に成功した．ここでは，この理論について説明する．

---

*　無限大を除くことはできても，そのとき特殊相対論の要請をみたすことが難しいのである．

そこでまず，自由電子の自己エネルギーの計算からはじめる．このとき，系のハミルトニアンは，(1.51)で電気双極子近似をとると

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 + \hat{H}_{\mathrm{rad}} - \frac{e}{m}\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\hat{\boldsymbol{p}} \tag{5.1}$$

で与えられる．ここで

$$\hat{H}_{\mathrm{rad}} = \sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}[\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)} + 1/2]$$

である．なお，(1.51)の右辺の第3項で電気双極子近似をとった相互作用は，無限大の定数を与えるだけなので，ここでは考えなくてよい．

さていま，運動量 $\boldsymbol{p}$ をもって自由運動をしている電子があるとする．その電子の状態ベクトルは，(5.1)の右辺の第1項の固有状態 $|\boldsymbol{p}\rangle$ で与えられる．一方そのときに，光子は1個も存在しないとしているので，その状態は(5.1)の第2項の $\hat{H}_{\mathrm{rad}}$ の基底状態 $|0\rangle$ で表わされる．したがって，電子と光子の間に相互作用のない無摂動系の状態ベクトルは $|0,\boldsymbol{p}\rangle=|0\rangle|\boldsymbol{p}\rangle$ で与えられる．光子の数演算子 $\hat{N}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ と，電磁波の振幅を与える演算子 $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ および $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}$ との間には，交換関係

$$[\hat{N}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}] = -\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}, \qquad [\hat{N}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}, \hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}] = +\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}$$

が成立する．したがって，光子の個数と電磁波の振幅の同時固有状態をとることはできない．つまり，光子が1個も存在しない $\hat{N}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ の基底状態であっても，電磁波の振幅 $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ と $\hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}$ は0ではない．(5.1)の右辺の第3項は，この電磁波の振幅と電子の相互作用を記述するものであり，この相互作用による電子のエネルギーの補正項が電子の自己エネルギーを与える．

状態 $|0,\boldsymbol{p}\rangle$ におけるエネルギーの第1近似の補正項

$$\langle 0,\boldsymbol{p}|(-e/m)\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|0,\boldsymbol{p}\rangle$$

は明らかに0である．そこで，摂動の第2近似の補正項 $\Delta\mathcal{E}_F$ を求めると，それは

$$\Delta\mathcal{E}_F = \left(\frac{e}{m}\right)^2\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}'}\sum_{\lambda=1,2}\frac{\langle 0,\boldsymbol{p}|\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}'\rangle\langle\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}'|\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|0,\boldsymbol{p}\rangle}{\boldsymbol{p}^2/2m-(\boldsymbol{p}'^2/2m+\hbar\omega_{\boldsymbol{k}})} \tag{5.2}$$

で与えられる．ここで，中間状態 $|\boldsymbol{k},\boldsymbol{p}'\rangle=|\boldsymbol{k}\rangle|\boldsymbol{p}'\rangle$ は，運動量 $\boldsymbol{p}'$ の電子と波数 $\boldsymbol{k}$ の光子が1個存在する状態を表わしている．(5.2)の分子の行列要素は，

(1.44)より

$$\langle 0, \boldsymbol{p} | \hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0) \cdot \hat{\boldsymbol{p}} | \boldsymbol{k}, \boldsymbol{p}' \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3 \omega_{\boldsymbol{k}}}} \langle \boldsymbol{p} | \hat{\boldsymbol{p}} | \boldsymbol{p}' \rangle \cdot \boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}) \langle 0 | \hat{a}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)} | \boldsymbol{k} \rangle$$
$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3 \omega_{\boldsymbol{k}}}} \delta_{\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}'} \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$$

で与えられる．これを(5.2)に代入すると

$$\Delta \mathcal{E}_F = \left(\frac{e}{m}\right)^2 \cdot \frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3} \sum_{\boldsymbol{k}} \sum_{\lambda=1,2} \frac{(\boldsymbol{e}^{(\lambda)} \cdot \boldsymbol{p})(\boldsymbol{e}^{(\lambda)} \cdot \boldsymbol{p})}{-\hbar \omega_{\boldsymbol{k}}{}^2}$$
$$= -\left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{1}{2\varepsilon_0 L^3} \sum_{i,j} p_i p_j \cdot \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}^3 k}{\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2} \left(\delta_{i,j} - \frac{k_i k_j}{k^2}\right)$$
$$= -\left(\frac{e}{m}\right)^2 \frac{1}{2(2\pi)^3 \varepsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}^3 k}{\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2} \left[\boldsymbol{p}^2 - \frac{(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p})(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{p})}{\boldsymbol{k}^2}\right] \qquad (5.3)$$

となる．2番目の等号では，(1.45)のときと同様の計算をしている．ここで $\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{k} = pk \cos\theta$ とおいて，$\boldsymbol{k}$ の方向についての角積分を行うと

$$\int_0^{\pi} \cos^2\theta \cdot \sin\theta \, \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi = \frac{4\pi}{3}$$

である．これより

$$\Delta \mathcal{E}_F = -\left(\frac{e}{m}\right)^2 \cdot \frac{1}{2\varepsilon_0} \cdot \frac{\boldsymbol{p}^2}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{c^2} \left(1 - \frac{1}{3}\right) \int_0^{\infty} \mathrm{d}k$$
$$= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m^2} \left[-\frac{4}{3\pi} \alpha \cdot \frac{\hbar}{c^2} \int_0^{\infty} \mathrm{d}\omega_{\boldsymbol{k}}\right] \qquad (5.4)$$

がえられる．右辺の積分は無限大の1次の発散量である．そこで

$$\delta m = \frac{4}{3\pi} \cdot \alpha \cdot \frac{\hbar}{c^2} \int_0^{\infty} \mathrm{d}\omega_{\boldsymbol{k}} \qquad (5.5)$$

とおくと，自由電子のエネルギー $\mathcal{E}_F$ は

$$\mathcal{E}_F = \frac{1}{2m} \boldsymbol{p}^2 - \frac{\delta m}{2m^2} \boldsymbol{p}^2 = \frac{1}{2m}\left(1 - \frac{\delta m}{m}\right) \boldsymbol{p}^2 \cong \frac{1}{2(m + \delta m)} \boldsymbol{p}^2 \qquad (5.6)$$

と表わすことができる．すなわち，(5.4)のエネルギーのずれは，電子の質量 m が電磁場との相互作用によって δm だけ変化したものとみなすことができる．そこでKramersは，観測されるのは，m と δm の別々の値ではなく，$m_{\mathrm{ob}} = m + \delta m$ の全体だけであると考えて，(5.1)のハミルトニアンを次のよう

に書きかえた．すなわち

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \frac{e}{m}\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{H}_{\mathrm{rad}} \\ &= \frac{1}{2(m_{\mathrm{ob}}-\delta m)}\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \frac{e}{(m_{\mathrm{ob}}-\delta m)}\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \hat{H}_{\mathrm{rad}} \\ &\cong \frac{1}{2m_{\mathrm{ob}}}\hat{\boldsymbol{p}}^2 - \frac{e}{m_{\mathrm{ob}}}\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \frac{\delta m}{m_{\mathrm{ob}}}\cdot\frac{1}{2m_{\mathrm{ob}}}\hat{\boldsymbol{p}}^2 + \hat{H}_{\mathrm{rad}}\,. \end{aligned} \tag{5.7}$$

この(5.7)の最後の表式の第2項の相互作用を用いて，もういちど自由電子の自己エネルギーを求めると，(5.7)の右辺の第3項のおかげで

$$\Delta\mathcal{E}_F = \frac{1}{2m_{\mathrm{ob}}{}^2}\boldsymbol{p}^2\left[-\frac{4}{3\pi}\alpha\cdot\frac{\hbar}{c^2}\int_0^\infty \mathrm{d}\omega_{\boldsymbol{k}} + \delta m\right] = 0 \tag{5.8}$$

となる．このような操作を **“くりこみ”** という．上の表式における観測される質量 m_{ob} を**くりこまれた質量**といい，m を**裸の質量**，δm を**着物の質量**などという．

第2次世界大戦の直後に，Tomonaga，Schwinger，Feynman，および Dyson らは，量子電磁気学を相対論的に不変な形式に再定式化し，電子の質量と電荷および電子の波動関数の3個の発散量に“くりこみ”の操作をほどこすことによって，摂動計算の任意の次数で，すべての観測可能な物理量が有限な値になることを示した．これを“くりこみ”理論といい，この処法は，場の理論の発散の困難を避ける方法として，現在でもひろく利用されている．そして，この理論にもとづいて，この§5の主題である Lamb シフトおよび電子の異常磁気双極子モーメントを驚くべき精度で説明することに成功したのである．しかし，非相対論的量子力学の理論の解説を主目的とする本書では，非相対論的な計算によって，Lamb シフトの大よその値を求めることで満足することにする．

水素原子内に束縛されている電子の自己エネルギーを求めるときのハミルトニアンは，(5.7)に水素原子内の陽子と電子の間にはたらく Coulomb の引力ポテンシャル $V(\boldsymbol{r}) = -e^2/4\pi\varepsilon_0 r$ を加えて

$$\hat{H} = \frac{1}{2m_{\mathrm{ob}}}\hat{\boldsymbol{p}}^2 + V(\hat{\boldsymbol{r}}) - \frac{e}{m_{\mathrm{ob}}}\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\hat{\boldsymbol{p}} + \left(\frac{\delta m}{m_{\mathrm{ob}}}\right)\frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m_{\mathrm{ob}}} + \hat{H}_{\mathrm{rad}} \tag{5.9}$$

で表わされる．ここで δm は(5.5)で与えられている発散量である．(5.9)を用

いて，摂動の第2次近似で原子に束縛されている電子の自己エネルギーを求めると，それは

$$\varDelta\mathcal{E}_B = \varDelta\mathcal{E}_B{}^{(1)}+\varDelta\mathcal{E}_B{}^{(2)}$$

で与えられる．ここで

$$\varDelta\mathcal{E}_B{}^{(1)} = \left(\frac{e}{m_{\mathrm{ob}}}\right)^2\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{n}\sum_{\lambda=1,2}\frac{\langle 0,i|\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{k},n\rangle\langle\boldsymbol{k},n|\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|0,i\rangle}{\mathcal{E}_i-\mathcal{E}_n-\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}, \tag{5.10}$$

$$\varDelta\mathcal{E}_B{}^{(2)} = \frac{\delta m}{m_{\mathrm{ob}}}\cdot\frac{1}{2m_{\mathrm{ob}}}\langle 0,i|\hat{\boldsymbol{p}}^2|0,i\rangle \tag{5.11}$$

である．なお，上の状態ベクトル $|0,i\rangle\equiv|0\rangle|i\rangle$ は，光子の真空状態 $|0\rangle$ と，水素原子の固有ベクトル $|i\rangle$ の直積である．(5.10)の分子の行列要素は

$$\langle 0,i|\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\hat{\boldsymbol{p}}|\boldsymbol{k},n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}}\langle i|\hat{\boldsymbol{p}}|n\rangle\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$$

で与えられる．これを用いると

$$\begin{aligned}\varDelta\mathcal{E}_B{}^{(1)} &= \left(\frac{e}{m_{\mathrm{ob}}}\right)^2\sum_{\boldsymbol{k},n}\sum_{\lambda=1,2}\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}\cdot\frac{(\boldsymbol{e}^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{p}_{in})(\boldsymbol{e}^{(\lambda)}\cdot\boldsymbol{p}_{ni})}{\mathcal{E}_i-(\mathcal{E}_n+\hbar\omega_{\boldsymbol{k}})}\\ &= \left(\frac{e}{m_{\mathrm{ob}}}\right)^2\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3}\frac{2}{3}\sum_n|\boldsymbol{p}_{in}|^2\cdot\frac{L^3}{(2\pi)^3}\int_0^\infty\frac{4\pi k^2\mathrm{d}k}{\omega_{\boldsymbol{k}}(\mathcal{E}_i-\mathcal{E}_n-\hbar\omega_{\boldsymbol{k}})}\\ &= -\frac{2}{3\pi}\cdot\alpha\cdot\left(\frac{\hbar}{m_{\mathrm{ob}}c}\right)^2\sum_n|\boldsymbol{p}_{in}|^2\int_0^\infty\frac{\omega_{\boldsymbol{k}}\mathrm{d}\omega_{\boldsymbol{k}}}{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}+\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i}\end{aligned}$$

となる．なおここで，2番目の等号では，(5.3)と同様の計算を行った．また

$$\begin{aligned}\varDelta\mathcal{E}_B{}^{(2)} &= \frac{\delta m}{m_{\mathrm{ob}}}\cdot\frac{1}{2m_{\mathrm{ob}}}\langle 0,i|\hat{\boldsymbol{p}}^2|0,i\rangle\\ &= \frac{1}{2m_{\mathrm{ob}}{}^2}\sum_n|\boldsymbol{p}_{in}|^2\cdot\frac{4}{3\pi}\alpha\cdot\frac{\hbar}{c^2}\int_0^\infty\mathrm{d}\omega_{\boldsymbol{k}}\end{aligned}$$

である．ここで δm に(5.5)の表式を代入している．これらの結果を加え合わせると

$$\begin{aligned}\varDelta\mathcal{E}_B &= \varDelta\mathcal{E}_B{}^{(1)}+\varDelta\mathcal{E}_B{}^{(2)}\\ &= +\frac{2}{3\pi}\cdot\frac{\alpha}{(m_{\mathrm{ob}}c)^2}\sum_n|\boldsymbol{p}_{in}|^2(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i)\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}(\hbar\omega_{\boldsymbol{k}})}{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}+(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i)}\end{aligned} \tag{5.12}$$

となる．この積分は対数的に発散する．しかし，より精密な相対論的計算では

発散せずに収束する．そこでここでは，積分の上限を相対論的エネルギー $m_{\rm ob}c^2$ で切断することにする．このとき，(5.12)は

$$\varDelta\mathcal{E}_B = +\frac{2}{3\pi}\cdot\frac{\alpha}{(m_{\rm ob}c)^2}\sum_n |\boldsymbol{p}_{in}|^2(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i)\log\frac{m_{\rm ob}c^2}{|\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i|} \qquad (5.13)$$

で与えられる．ここで Bethe にしたがって

$$\log|\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i|_{\rm av} \equiv \frac{\sum_n |\boldsymbol{p}_{in}|^2(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i)\log|\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i|}{\sum_n |\boldsymbol{p}_{in}|^2(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i)} \qquad (5.14)$$

によって，平均値 $|\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i|_{\rm av}$ を定義すると，(5.13)は

$$\varDelta\mathcal{E}_B = +\frac{2}{3\pi}\frac{\alpha}{(m_{\rm ob}c)^2}\left[\sum_n |\boldsymbol{p}_{in}|^2(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i)\right]\cdot\log\frac{m_{\rm ob}c^2}{|\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i|_{\rm av}} \qquad (5.15)$$

と表わされる．

さて，水素原子のハミルトニアン

$$\hat{H}_0 = \hat{\boldsymbol{p}}^2/2m_{\rm ob}+V(\hat{\boldsymbol{r}})$$

において，$\hat{H}_0|n\rangle=\mathcal{E}_n|n\rangle$ とすると，総和則

$$\sum_n |\boldsymbol{p}_{in}|^2(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i) = +\frac{\hbar^2}{2}\langle i|\triangle V(\hat{\boldsymbol{r}})|i\rangle \qquad (5.16)$$

が成立することが証明できる(問 69)．

$V(r)=-e^2/4\pi\varepsilon_0 r$ のとき，

$$\triangle V(r) = e^2\delta^3(\boldsymbol{r})/\varepsilon_0$$

である．したがって，

$$\begin{aligned}\sum_n |\boldsymbol{p}_{in}|^2(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i) &= +\frac{\hbar^2e^2}{2\varepsilon_0}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r})\delta^3(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r\\ &= +\frac{\hbar^2e^2}{2\varepsilon_0}|\psi(0)|^2 \qquad (5.17)\end{aligned}$$

となる．ここで $\psi(\boldsymbol{r})$ は水素原子の固有関数である．そこで第 3 章(4.23)の水素原子の固有関数を用いると，2s 状態のときには $|\psi_{2s}(0)|^2=1/2^3\pi a_0{}^3$ であり，2p 状態のときには $|\psi_{2p}(0)|^2=0$ である．したがって，2s-2p 状態間のエネルギー差，すなわち Lamb シフト $\varDelta\mathcal{E}_{\rm L.S.}$ は，$a_0=\hbar/m_{\rm ob}c\alpha$ を用いると

$$\Delta\mathcal{E}_{\text{L.S.}} = +\frac{2}{3\pi}\cdot\frac{\alpha}{(m_{\text{ob}}c)^2}\cdot\frac{\hbar^2e^2}{2\varepsilon_0}\cdot\frac{1}{8\pi a_0{}^3}\log\left(\frac{m_{\text{ob}}c^2}{|\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i|_{\text{av}}}\right)$$
$$= \frac{1}{3\pi}\cdot\alpha^3 E_{\text{Ryd}}\log\left(\frac{m_{\text{ob}}c^2}{|\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i|_{\text{av}}}\right)$$
$$= 0.90\times10^{-25}\times\log\left(\frac{m_{\text{ob}}c^2}{|\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i|_{\text{av}}}\right)\text{ J} \qquad (5.18)$$

で与えられる．Betheは，(5.14)の平均値を数値的に計算することによって，$|\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i|_{\text{av}}=17.8\,E_{\text{Ryd}}$という値をえている*．また観測値$m_{\text{ob}}c^2=0.51\times10^6$ eV $=3.75\times10^4\,E_{\text{Ryd}}$を用いると

$$\Delta\mathcal{E}_{\text{L.S.}} = 0.90\times7.65\times10^{-25} = 6.89\times10^{-25}\text{ J} \qquad (5.19)$$

となる．この値を振動数に直すと

$$\Delta\nu = \Delta\mathcal{E}_{\text{L.S.}}/h = 1{,}040\text{ MHz}$$

である．実験値との一致は見事というほかはない．なお，(5.14)の数値計算をせずに，(5.12)の積分の下限をRydbergエネルギーE_{Ryd}の2倍$m_{\text{ob}}c^2\times\alpha^2$の程度で切断すれば，積分値は$2\log 137=9.8$となる．この大ざっぱな近似を用いても，$\Delta\mathcal{E}_{\text{L.S.}}=0.90\times9.8\times10^{-25}=8.8\times10^{-25}$ Jとなり，(5.19)のBetheのえた結果と大きな違いは生じない．これを振動数に直せば，$\Delta\nu=\Delta\mathcal{E}_{\text{L.S.}}/h\cong$ 1,300 MHzである．

なお，相対論的効果をも考慮したより精密な理論値は

$$\Delta\nu = 1{,}057.864\text{ MHz}$$

であり，一方，最近の実験値は

$$\Delta\nu_{\text{exp}} = 1{,}057.862\pm0.020\text{ MHz}$$

で，その一致はまことに驚くべきものである．

問69　(5.16)の総和則を証明せよ．

§6　レーザーの量子論

レーザーは，量子電磁気学の実用的機器へのこれまでの最大の応用例であるといえよう．このレーザー(laser)とは，**L**ight **A**mplification by **S**timulated **E**mission of **R**adiation の頭文字をとってつくられた言葉である．この装置は，

---

*　この数値計算のやり方については，Bethe & Salpeter; Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms(1977)，Plenum-Rosetta Ed. を参照のこと．

光共振器と，この内部におかれたレーザー物質および外部からレーザー物質にエネルギーを供給する放電装置とから構成されている．放電によって，レーザー物質内の原子が刺激されて，上のエネルギー準位 E_a に分布する原子数が，下のエネルギー準位 E_b にある原子数よりも大きくなる．この操作を**ポンピング**といい，このような原子数の分布を**反転分布**という．反転分布が生じると，原子系から放射される光子数は，吸収される光子数よりも多くなる．そこでいま，ある特定の波数ベクトル $\boldsymbol{k}_1$ をもつ光子が n_1 個，その他の光子が 0 個の状態 $|n_1, 0_2, 0_3, \cdots, 0_\infty\rangle$ に，いろいろな波数の生成演算子を作用させると，

$$\sum_{\boldsymbol{k}} \hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger |n_1, 0_2, 0_3, \cdots, 0_\infty\rangle = \sqrt{n_1+1}\,|n_1+1, 0_2, \cdots\rangle + \sqrt{1}\,|n_1, 1_2, 0_3, \cdots\rangle + \cdots \tag{6.1}$$

となり，特定の波数ベクトル $\boldsymbol{k}_1$ をもつ光子を放射する確率は，すでに存在している光子数 n_1 に比例する．これが**誘導放射**である．このためひとたび $\boldsymbol{k}_1$ の光子数が増大すると，その数はねずみ算的に増大し特定の波数ベクトル $\boldsymbol{k}_1$ をもつ光の強度が増幅される．なお，$\sqrt{n_1+1}$ の 1 の部分と，他の波数の部分は**自発放射**を与え，これは可能なすべての波数をとることができる．光共振器は，反射率の高い 2 枚の鏡を平行に向かい合わせたもので，鏡面に垂直な方向に進行する特定の波数をもつ光を選び出して，それをくりかえし反射往復させてレーザー物質にフィードバックさせ，誘導放射を促進する．このとき，自発放射によって発生した光は系外に散逸してしまう．こうしてえられるレーザー光の特徴の第 1 は，その異常な強度であり，その第 2 は，特定の波数ベクトル $\boldsymbol{k}_1$ の光だけが増幅されることによる単色性と指向性である．第 3 の特色は，レーザー光の位相の安定性である．レーザー光はその位相がラジオ波のようにそろっているため，電球の光を分離した単色光の可干渉な光路差が数 cm ないし数 m の程度であるのに対して，その距離は 1,000 km にも達する．以下に展開する理論は，レーザー光のこのような特異な性質を，量子電磁気学にもとづいて微視的な見地から説明することである．

(1) レーザー原子と光の相互作用

距離 L をおいて設置された 2 枚の平行な鏡に垂直な方向を x 軸にとり，鏡面に平行な平面内に y 軸と z 軸をとる．これらの鏡の間にできる x 方向の定常

波の波数は，$k_x=\pi n_x/L$ ($n_x=1,2,3,\cdots$) で与えられる．x 方向以外の光は，鏡による反射をくりかえして系外に散逸してしまう．また，鏡の間におかれたレーザー物質の端に偏光板を挿入することによって，特定の直線的な偏りをもつ光波だけを取り出すこともできる．数式を簡単化するために，ここでは上の定常波のかわりに第5章(2.24)の進行波を用いることにする．そのときに許される波数は，$k_x=2\pi n_x/L$ ($n_x=0,\pm1,\pm2,\cdots$) となる．

レーザー物質は N 個の同種原子から構成されていて，それらの原子は位置 $\boldsymbol{R}_i=(X_i,Y_i,Z_i)$ ($i=1,2,\cdots,N$) に固定されているものとする．また，それらの原子内の電子のエネルギー準位のうちの固有値が $\hbar\omega_\mathrm{a}$ と $\hbar\omega_\mathrm{b}$ ($<\hbar\omega_\mathrm{a}$) の二つの準位の間でレーザー作用がおきるものとする．i 番目の原子内の電子のハミルトニアンを $\hat{H}_\mathrm{A}^{(i)}$ とすると，その規格化された固有ベクトルは

$$\hat{H}_\mathrm{A}^{(i)}|\alpha,i\rangle=\hbar\omega_\alpha|\alpha,i\rangle \tag{6.2}$$

で与えられる．ここで i は原子の番号，$\alpha=\mathrm{a},\mathrm{b}$ は電子の状態を示す量子数である．原子の状態が a から b に転移するとき，放出される光子のエネルギーは $\hbar\omega_0=\hbar(\omega_\mathrm{a}-\omega_\mathrm{b})$ で与えられる．しかし本当は，原子のそれぞれのエネルギー準位は幅をもっていて，そのために放射される光のスペクトルもまた幅をもっている．このスペクトルのひろがりのなかの，共振器の固有振動のエネルギー $\hbar\omega\equiv2\pi\hbar n_x/L$ に一致する光だけが増幅される．簡単のために以下では，原子から放射される光のスペクトルの中心の値 $\hbar\omega_0$ が，共振器の特定の固有振動のエネルギー $\hbar\omega$ に一致している共鳴状態を考えることにする．この光の波数ベクトルを $\boldsymbol{k}=(k,0,0)$ とし，光は z 方向に直線的に偏っているものとする．このとき，全系のハミルトニアンは，電気双極子近似のもとで

$$\hat{H}=\sum_{i=1}^{N}\hat{H}_\mathrm{A}^{(i)}+\hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}-i\sum_{i=1}^{N}e\hat{z}^{(i)}E(\hat{a}\,\mathrm{e}^{ikX_i}-\hat{a}^\dagger\mathrm{e}^{-ikX_i}) \tag{6.3}$$

で与えられる．ここで $\hat{a}\equiv\hat{a}_{\boldsymbol{k}}$，$\hat{a}^\dagger\equiv\hat{a}_{\boldsymbol{k}}^\dagger$ で，$\omega_0=\omega$ の特定の1個のモードだけを考えている．なお，(1.44)より $E\equiv\sqrt{\hbar\omega/2\varepsilon_0L^3}$ である．さて，Schrödinger 方程式

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\Psi(t)\rangle}{\mathrm{d}t}=\hat{H}|\Psi(t)\rangle$$

を相互作用表示に変換すると

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}|\boldsymbol{\Phi}(t)\rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{V}_I(t)|\boldsymbol{\Phi}(t)\rangle \tag{6.4}$$

となる．ここで

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{\Phi}(t)\rangle &= \exp\left[i\left(\sum_{i=1}^{N}\hat{H}_{\mathrm{A}}^{(i)}+\hbar\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}\right)t/\hbar\right]|\Psi(t)\rangle,\\ \hat{V}_I(t) &= -i\sum_{i=1}^{N}e\hat{z}_I^{(i)}(t)E\{\hat{a}\mathrm{e}^{i(kX_i-\omega t)}-\hat{a}^\dagger\mathrm{e}^{-i(kX_i-\omega t)}\}\end{aligned} \tag{6.5}$$

である．なお(6.5)で

$$\begin{aligned}\hat{z}_I^{(i)}(t) &= \mathrm{e}^{i\hat{H}_{\mathrm{A}}^{(i)}t/\hbar}\hat{z}^{(i)}\mathrm{e}^{-i\hat{H}_{\mathrm{A}}^{(i)}t/\hbar},\\ \hat{a}_I(t) &= \mathrm{e}^{i\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}t}\hat{a}\mathrm{e}^{-i\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}t} = \hat{a}\mathrm{e}^{-i\omega t},\\ \hat{a}_I{}^\dagger(t) &= \mathrm{e}^{i\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}t}\hat{a}^\dagger\mathrm{e}^{-i\omega\hat{a}^\dagger\hat{a}t} = \hat{a}^\dagger\mathrm{e}^{i\omega t}\end{aligned} \tag{6.6}$$

である．簡単のため，原子の固有状態は実関数で表わされると仮定して，電子の電気双極子モーメントを次のように書くことにする．すなわち

$$\mu = e\langle \mathrm{a}, i|\hat{z}^{(i)}|\mathrm{b}, i\rangle = e\langle \mathrm{b}, i|\hat{z}^{(i)}|\mathrm{a}, i\rangle. \tag{6.7}$$

ここで，(6.4)の方程式をみたす任意の状態ベクトル $|\boldsymbol{\Phi}(t)\rangle$ を次のように展開する．

$$|\boldsymbol{\Phi}(t)\rangle = \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N;n} C_n^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N}(t)|\alpha_1,1\rangle|\alpha_2,2\rangle\cdots|\alpha_N,N\rangle|n\rangle. \tag{6.8}$$

ここで $\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N$ は a または b であり，$|n\rangle$ は光子の数演算子 $\hat{n}\equiv\hat{a}^\dagger\hat{a}$ の固有値 n（$=0,1,2,\cdots$）に属する固有ベクトルである．(6.8)の展開式を(6.4)に代入すると，次の方程式がえられる．

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}C_n^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N}(t)}{\mathrm{d}t} = &-\left(\frac{eE}{\hbar}\right)\sum_{\beta_1,m}C_m^{\beta_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N}(t)\langle\alpha_1|\hat{z}_I^{(1)}(t)|\beta_1\rangle\\ &\times[\langle n|\hat{a}|m\rangle\mathrm{e}^{i(kX_1-\omega t)}-\langle n|\hat{a}^\dagger|m\rangle\mathrm{e}^{-i(kX_1-\omega t)}]\\ &+\cdots\cdots\\ &-\left(\frac{eE}{\hbar}\right)\sum_{\beta_N,m}C_m^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\beta_N}(t)\langle\alpha_N|\hat{z}_I^{(N)}(t)|\beta_N\rangle\\ &\times[\langle n|\hat{a}|m\rangle\mathrm{e}^{i(kX_N-\omega t)}-\langle n|\hat{a}^\dagger|m\rangle\mathrm{e}^{-i(kX_N-\omega t)}].\end{aligned} \tag{6.9}$$

いまの問題では，それぞれの原子による光子の放出・吸収過程に関心があり，光子の交換による原子間の相互作用に興味があるわけではない．そこで，必要

とする過程を分離するために，ここで微分操作 $\mathrm{d}/\mathrm{d}t_i$ を

$$\frac{\mathrm{d}C_n^{\alpha_1,\cdots,\alpha_i,\cdots,\alpha_N}(t)}{\mathrm{d}t_i} \equiv -\left(\frac{eE}{\hbar}\right)\sum_{\beta_i,m} C_m^{\alpha_1,\cdots,\beta_i,\cdots,\alpha_N}(t)\langle\alpha_i|\hat{z}_I^{(i)}(t)|\beta_i\rangle \times\left[\langle n|\hat{a}|m\rangle \mathrm{e}^{i(kX_i-\omega t)}-\langle n|\hat{a}^\dagger|m\rangle \mathrm{e}^{-i(kX_i-\omega t)}\right] \tag{6.10}$$

で定義する．この操作は，(6.9)の時間微分 $\mathrm{d}/\mathrm{d}t$ を行ったあとで，右辺の i 番目の原子の状態の転移を記述する項を取り出す操作である．そういう意味で，これを**原子微分**と名づけることにする．明らかに

$$\frac{\mathrm{d}C_n^{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}(t)}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{N}\frac{\mathrm{d}C_n^{\alpha_1,\cdots,\alpha_i,\cdots,\alpha_N}(t)}{\mathrm{d}t_i} \tag{6.11}$$

である．ここで

$$e\langle \mathrm{a}, i|\hat{z}_I^{(i)}(t)|\mathrm{b}, i\rangle = \mu \mathrm{e}^{i\omega t},$$
$$\langle n|\hat{a}|m\rangle = \mathrm{e}^{i\delta}\sqrt{m}\,\delta_{n,m-1}, \quad \langle n|\hat{a}^\dagger|m\rangle = \mathrm{e}^{-i\delta}\sqrt{m+1}\,\delta_{n,m+1} \tag{6.12}$$

とする．ここで δ は不定の位相である．これを(6.10)に代入すると

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}C_n^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}(t)}{\mathrm{d}t_i} &= -\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\sqrt{n+1}\,C_{n+1}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}(t)\mathrm{e}^{i\phi_i},\\ \frac{\mathrm{d}C_n^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}(t)}{\mathrm{d}t_i} &= +\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\sqrt{n}\,C_{n-1}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}(t)\mathrm{e}^{-i\phi_i}\end{aligned} \tag{6.13}$$

となる．ここで $\phi_i \equiv kX_i+\delta$ である．このとき激しく振動する $\exp[\pm 2i\omega t]$ に比例する項を落している．この近似を**回転波近似**という*．

さて，(6.8)の展開で，状態 $|\Phi(t)\rangle$ が規格化されているとき，

$$\sum_{\substack{\alpha_1,\cdots,\alpha_N\\ n}} C_n^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N}(t)\,C_n^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N *}(t) = 1 \tag{6.14}$$

である．光子が n 個ある状態において，他のすべての原子の状態を測定しないとき，i 番目の原子を状態 a と状態 b に発見する確率は，それぞれ

$$\begin{aligned}\rho_{n,n}^{\mathrm{a,a}}(i) &\equiv \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}^{(i)} C_n^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}(t)\,C_n^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N *}(t),\\ \rho_{n,n}^{\mathrm{b,b}}(i) &\equiv \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}^{(i)} C_n^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}(t)\,C_n^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N *}(t)\end{aligned} \tag{6.15}$$

---

*　この言葉は，核磁気共鳴の理論の用語に由来する．

で与えられる．ここで右辺の和の記号の右肩の(i)は，i番目の原子の状態α_iに関する和をとらないことを意味する．すべての原子の状態に無関係に，n個の光子を発見する確率は

$$\rho_{n,n} \equiv \sum_{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N} C_n^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N}(t)\, C_n^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N *}(t) \tag{6.16}$$

で与えられる．そこで，i番目の原子に関する密度行列を，第2章(7.11)にならって

$$\begin{aligned}
\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}(i) &\equiv \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}^{(i)} C_n^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}(t)\, C_m^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N *}(t),\\
\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}(i) &\equiv \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}^{(i)} C_n^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}(t)\, C_m^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N *}(t),\\
\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,b}}(i) &\equiv \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}^{(i)} C_n^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}(t)\, C_m^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N *}(t),\\
\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,a}}(i) &\equiv \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}^{(i)} C_n^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}(t)\, C_m^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N *}(t)
\end{aligned} \tag{6.17}$$

で定義する．また光子の密度行列を

$$\rho_{n,m} \equiv \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N} C_n^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N}(t)\, C_m^{\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_N *}(t) \tag{6.18}$$

で定義する．

そこで，(6.17)の原子微分をとって(6.13)の方程式を代入すると，i番目の原子の密度行列のみたす方程式系

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}(i)}{\mathrm{d}t_i} &= -\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)[\sqrt{n+1}\,\rho_{n+1,m}{}^{\mathrm{b,a}}(i)\mathrm{e}^{i\phi_i}+\sqrt{m+1}\,\rho_{n,m+1}{}^{\mathrm{a,b}}(i)\,\mathrm{e}^{-i\phi_i}],\\
\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}(i)}{\mathrm{d}t_i} &= +\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)[\sqrt{n}\,\rho_{n-1,m}{}^{\mathrm{a,b}}(i)\mathrm{e}^{-i\phi_i}+\sqrt{m}\,\rho_{n,m-1}{}^{\mathrm{b,a}}(i)\,\mathrm{e}^{i\phi_i}],\\
\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,b}}(i)}{\mathrm{d}t_i} &= +\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)[\sqrt{m}\,\rho_{n,m-1}{}^{\mathrm{a,a}}(i)-\sqrt{n+1}\,\rho_{n+1,m}{}^{\mathrm{b,b}}(i)]\mathrm{e}^{i\phi_i},\\
\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,a}}(i)}{\mathrm{d}t_i} &= +\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)[\sqrt{n}\,\rho_{n-1,m}{}^{\mathrm{a,a}}(i)-\sqrt{m+1}\,\rho_{n,m+1}{}^{\mathrm{b,b}}(i)]\mathrm{e}^{-i\phi_i}
\end{aligned} \tag{6.19}$$

がえられる．一方，光子系の時間的変化はすべての原子の状態の転移によって生じるから，その変動は全体の時間微分 $\mathrm{d}/\mathrm{d}t$ によって記述される．(6.17)と(6.18)を比較すると，$\rho_{n,m}=\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}(i)+\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}(i)$ であるから

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}}{\mathrm{d}t}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}(i)+\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}(i)]$$
$$=\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}(i)}{\mathrm{d}t_j}+\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}(i)}{\mathrm{d}t_j}\right]$$

である．ここで

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}(i)}{\mathrm{d}t_j}+\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}(i)}{\mathrm{d}t_j}=\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}(j)}{\mathrm{d}t_j}+\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}(j)}{\mathrm{d}t_j} \tag{6.20}$$

の関係が成立することに注目する．(6.20)の関係は，(6.10)の原子微分の定義にしたがって左辺の微分を行い，その結果を組みかえて(6.19)を利用することによって証明される(問70)．

(6.20)の関係を用いると

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}}{\mathrm{d}t}=\sum_{j=1}^{N}\left[\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}(j)}{\mathrm{d}t_j}+\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}(j)}{\mathrm{d}t_j}\right] \tag{6.21}$$

がえられる．

問70　(6.20)の関係式を証明せよ．

(2)　光子のロス

レーザーは，(1)で記述したような閉じた体系ではなく，外部に開かれた体系である．すなわち，それにはポンピングによって外部からエネルギーが供給され，また，共振器の鏡の一部を半透明にして，光の一部は外部に取り出される．ここでは，このような光子のロス効果を密度行列によって記述する方法を述べよう．

光子のレーザー系からのロスは，光子系が系外の巨大な熱溜と相互作用して，その熱溜により光子が吸収されることによっておきると考えることができる．熱溜を構成する原子系のハミルトニアンを$\hat{H}_{\mathrm{C}}$とし，その二つのエネルギー準位を$E_{\mathrm{A}}, E_{\mathrm{B}}$と書き，$\Omega=(E_{\mathrm{A}}-E_{\mathrm{B}})/\hbar>0$と仮定する．このとき，光子と熱溜からなる系は(6.3)と同様に，ハミルトニアン

$$\hat{H}=\hat{H}_{\mathrm{C}}+\hbar\omega\hat{a}^{\dagger}\hat{a}-ig\hat{z}E(\hat{a}-\hat{a}^{\dagger})$$

で記述される．ここでgは熱溜の原子と光子との相互作用を示す定数である．この系に対して，(6.19)に相当する方程式をつくると，

$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{A,A}}{dt} = -\left(\frac{\nu E}{\hbar}\right)[\sqrt{n+1}\,e^{-i(\omega-\Omega)t}\rho_{n+1,m}{}^{B,A} + \sqrt{m+1}\,e^{i(\omega-\Omega)t}\rho_{n,m+1}{}^{A,B}],$$

$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{B,B}}{dt} = +\left(\frac{\nu E}{\hbar}\right)[\sqrt{n}\,e^{i(\omega-\Omega)t}\rho_{n-1,m}{}^{A,B} + \sqrt{m}\,e^{-i(\omega-\Omega)t}\rho_{n,m-1}{}^{B,A}],$$

$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{A,B}}{dt} = -\left(\frac{\nu E}{\hbar}\right)[\sqrt{n+1}\,e^{-i(\omega-\Omega)t}\rho_{n+1,m}{}^{B,B} - \sqrt{m}\,e^{-i(\omega-\Omega)t}\rho_{n,m-1}{}^{A,A}],$$

$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{B,A}}{dt} = +\left(\frac{\nu E}{\hbar}\right)[\sqrt{n}\,e^{i(\omega-\Omega)t}\rho_{n-1,m}{}^{A,A} - \sqrt{m+1}\,e^{i(\omega-\Omega)t}\rho_{n,m+1}{}^{B,B}] \tag{6.22}$$

がえられる．ここでνは熱溜原子の電気双極子モーメントである．熱溜は無限に大きな体系であり，熱溜内の原子が光子を吸収しても，熱溜内の原子は実質的にその基底状態Bにとどまっていると考えられる．すなわち，このとき

$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{A,A}(t)}{dt} \neq 0, \qquad \rho_{n,m}{}^{A,A}(t) = 0 \tag{6.23}$$

であるとしてよい．そこで，(6.22)の第3式と第4式の右辺で$\rho_{n,m}{}^{A,A}=0$とおいて，これらの方程式を積分すると，

$$\rho_{n,m}{}^{A,B}(t) = -\left(\frac{\nu E}{\hbar}\right)\sqrt{n+1}\int_{-\infty}^{t} dt'\,e^{-i(\omega-\Omega)t'}\rho_{n+1,m}{}^{B,B}(t'),$$

$$\rho_{n,m}{}^{B,A}(t) = -\left(\frac{\nu E}{\hbar}\right)\sqrt{m+1}\int_{-\infty}^{t} dt'\,e^{i(\omega-\Omega)t'}\rho_{n,m+1}{}^{B,B}(t')$$

となる．これらを(6.22)の第1式に代入し，$\rho_{n,m}{}^{A,A}(t)=0$であるために，$\rho_{n,m}{}^{B,B}(t)$の時間的変動も小さいことを考慮すると

$$\begin{aligned}\frac{d\rho_{n,m}{}^{A,A}}{dt} &\cong \left(\frac{\nu E}{\hbar}\right)^2\sqrt{(n+1)(m+1)}\,\rho_{n+1,m+1}{}^{B,B}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega-\Omega)\tau}d\tau \\ &= 2\pi\delta(\omega-\Omega)\left(\frac{\nu E}{\hbar}\right)^2\sqrt{(n+1)(m+1)}\,\rho_{n+1,m+1}{}^{B,B}\end{aligned} \tag{6.24}$$

をえる．一方，(6.22)の第2式は

$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{B,B}}{dt} = -\left(\frac{\nu E}{\hbar}\right)^2\rho_{n,m}{}^{B,B}\left[n\int_{-\infty}^{0} e^{-i(\omega-\Omega)\tau}d\tau + m\int_{0}^{\infty} e^{-i(\omega-\Omega)\tau}d\tau\right]$$

となる．ここで右辺の時間積分に収束因子$\exp[-\varepsilon|\tau|]$を挿入して，積分の後に$\varepsilon\to 0$の極限をとり，第2章(1.31)の公式を参照すると

$$\int_{-\infty}^{0} e^{-i(\omega-\Omega)\tau}\mathrm{d}\tau = +i\left[\mathrm{P}\frac{1}{\omega-\Omega}-i\pi\delta(\omega-\Omega)\right],$$
$$\int_{0}^{\infty} e^{-i(\omega-\Omega)\tau}\mathrm{d}\tau = -i\left[\mathrm{P}\frac{1}{\omega-\Omega}+i\pi\delta(\omega-\Omega)\right]$$

である．右辺の主値Pの項は，熱溜原子のLambシフトを与えるので，これを無視すると

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{B,B}}}{\mathrm{d}t} = -2\pi\delta(\omega-\Omega)\left(\frac{\nu E}{\hbar}\right)^2\cdot\left(\frac{n+m}{2}\right)\rho_{n,m}{}^{\mathrm{B,B}} \tag{6.25}$$

をえる．光子の密度行列は

$$\rho_{n,m} = \rho_{n,m}{}^{\mathrm{A,A}}+\rho_{n,m}{}^{\mathrm{B,B}}$$

で与えられるから，(6.24)と(6.25)より

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}}{\mathrm{d}t} &= -2\kappa\left(\frac{n+m}{2}\right)\rho_{n,m}{}^{\mathrm{B,B}}+2\kappa\sqrt{(n+1)(m+1)}\,\rho_{n+1,m+1}{}^{\mathrm{B,B}}\\ &= -2\kappa\left(\frac{n+m}{2}\right)\rho_{n,m}+2\kappa\sqrt{(n+1)(m+1)}\,\rho_{n+1,m+1}\end{aligned} \tag{6.26}$$

である．(6.26)の2番目の等号では，(6.23)の第2式により

$$\rho_{n,m} \cong \rho_{n,m}{}^{\mathrm{B,B}}$$

であることを利用し，また光子のロスの割合を示すパラメーターκを

$$2\kappa = 2\pi\delta(\omega-\Omega)(\nu E/\hbar)^2$$

で与えている．実際には，熱溜のΩには幅があり，また熱溜原子全体の自由度に関する和をとらねばならないが，ここで必要なのは(6.26)の右辺の形だけなので，定数κは現象論的なパラメーターと考えればよい．

(3)　レーザー系の基本方程式

以上の準備のもとで，開かれた体系としてのレーザー系を記述する基本方程式を与えよう．まず，原子の高いエネルギー状態aへの単位時間当りのポンピングの割合をλ_aとし，原子がいま考えている状態aとbから，それ以外のよりエネルギーの低い状態に転移する単位時間当りの割合を，それぞれγ_aおよびγ_bとする．このとき，(6.19)の方程式は次のように変形される．すなわち，

$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{a,a}(i)}{dt_i} = \lambda_a \rho_{n,m} - \gamma_a \rho_{n,m}{}^{a,a}(i)$$
$$-\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)[\sqrt{n+1}\,\rho_{n+1,m}{}^{b,a}(i)e^{i\phi_i} + \sqrt{m+1}\,\rho_{n,m+1}{}^{a,b}(i)e^{-i\phi_i}],$$
$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{b,b}(i)}{dt_i} = -\gamma_b \rho_{n,m}{}^{b,b}(i)$$
$$+\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)[\sqrt{n}\,\rho_{n-1,m}{}^{a,b}(i)e^{-i\phi_i} + \sqrt{m}\,\rho_{n,m-1}{}^{b,a}(i)e^{i\phi_i}],$$
$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{a,b}(i)}{dt_i} = -\gamma \rho_{n,m}{}^{a,b}(i)$$
$$+\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)[\sqrt{m}\,\rho_{n,m-1}{}^{a,a}(i) - \sqrt{n+1}\,\rho_{n+1,m}{}^{b,b}(i)]e^{i\phi_i},$$
$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{b,a}(i)}{dt_i} = -\gamma \rho_{n,m}{}^{b,a}(i)$$
$$+\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)[\sqrt{n}\,\rho_{n-1,m}{}^{a,a}(i) - \sqrt{m+1}\,\rho_{n,m+1}{}^{b,b}(i)]e^{-i\phi_i} \tag{6.27}$$

がえられる．ここで，(6.27)の第1式の右辺第1項の $\rho_{n,m}$ は光子の密度行列であり，ポンピングの強度はそこに存在する光子数に比例することを考慮してこれを追加している．また，第3式と第4式の右辺第1項で $\gamma=(\gamma_a+\gamma_b)/2$ である．

一般にレーザー系では，原子系は光子系よりもずっと速くその定常状態に到達する．そこで(6.27)の第3式と第4式の左辺を0とおいて，その定常値を求めると

$$\rho_{n,m}{}^{a,b}(i) = \left(\frac{\mu E}{\hbar\gamma}\right)[\sqrt{m}\,\rho_{n,m-1}{}^{a,a}(i) - \sqrt{n+1}\,\rho_{n+1,m}{}^{b,b}(i)]e^{i\phi_i},$$
$$\rho_{n,m}{}^{b,a}(i) = \left(\frac{\mu E}{\hbar\gamma}\right)[\sqrt{n}\,\rho_{n-1,m}{}^{a,a}(i) - \sqrt{m+1}\,\rho_{n,m+1}{}^{b,b}(i)]e^{-i\phi_i} \tag{6.28}$$

となる．これらを(6.27)の第1式と第2式の右辺に代入すると，その結果は，位相 ϕ_i に，したがって原子の位置 $\boldsymbol{R}_i$ に無関係になる．そこで原子の番号 i を除いた結果を書くと

$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{a,a}}{dt} = \lambda_a \rho_{n,m} - \gamma_a \rho_{n,m}{}^{a,a}$$
$$- \left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)^2 \cdot \gamma^{-1}\sqrt{n+1}\left[\sqrt{n+1}\,\rho_{n,m}{}^{a,a} - \sqrt{m+1}\,\rho_{n+1,m+1}{}^{b,b}\right]$$
$$- \left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)^2 \cdot \gamma^{-1}\sqrt{m+1}\left[\sqrt{m+1}\,\rho_{n,m}{}^{a,a} - \sqrt{n+1}\,\rho_{n+1,m+1}{}^{b,b}\right],$$
$$\frac{d\rho_{n,m}{}^{b,b}}{dt} = -\gamma_b \rho_{n,m}{}^{b,b}$$
$$+ \left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)^2 \cdot \gamma^{-1}\sqrt{n}\left[\sqrt{m}\,\rho_{n-1,m-1}{}^{a,a} - \sqrt{n}\,\rho_{n,m}{}^{b,b}\right]$$
$$+ \left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)^2 \cdot \gamma^{-1}\sqrt{m}\left[\sqrt{n}\,\rho_{n-1,m-1}{}^{a,a} - \sqrt{m}\,\rho_{n,m}{}^{b,b}\right] \qquad (6.29)$$

がえられる．

ここで原子系の定常状態における反転分布を求めておこう．(6.29)で $n=m$ とおき，左辺を0として，$B_0 \equiv 2(\mu E/\hbar)^2 \cdot \gamma^{-1}$ とすると，

$$\rho_{n,n}{}^{a,a} = \frac{\lambda_a[\gamma_b + B_0(n+1)]}{\gamma_a\gamma_b + 2\gamma B_0(n+1)}\rho_{n,n}, \qquad \rho_{n+1,n+1}{}^{b,b} = \frac{\lambda_a B_0(n+1)}{\gamma_a\gamma_b + 2\gamma B_0(n+1)}\rho_{n,n} \qquad (6.30)$$

をえる．光子の数にかかわらず，原子を状態aとbに発見する確率は，それぞれ

$$\rho^{a,a} = \sum_{n=0}^{\infty}\rho_{n,n}{}^{a,a}, \qquad \rho^{b,b} = \sum_{n=0}^{\infty}\rho_{n,n}{}^{b,b}$$

で与えられ，またそのときの平均光子数は

$$\bar{n} = \sum_{n=0}^{\infty} n\,\rho_{n,n}$$

で表わされる．そこで，(6.30)の右辺の $n+1$ を平均値 $\bar{n}$ でおきかえると，(6.30)は

$$\rho^{a,a} \cong \frac{\lambda_a[\gamma_b + B_0\bar{n}]}{\gamma_a\gamma_b + 2\gamma B_0\bar{n}}, \qquad \rho^{b,b} \cong \frac{\lambda_a B_0\bar{n}}{\gamma_a\gamma_b + 2\gamma B_0\bar{n}}$$

と近似することができる．これより，原子の反転分布数は，近似的に

$$D \equiv N(\rho^{a,a} - \rho^{b,b}) = \frac{N\lambda_a\gamma_b}{\gamma_a\gamma_b + 2\gamma B_0\bar{n}} \qquad (6.31)$$

で与えられる．この結果をみると，$\gamma_b=0$ のとき $D=0$ である．すなわち，反転分布をえるには，原子の2個の準位aとbのほかに，少なくとももう1個のより低い準位が存在しなければならないことが分かる．レーザーを作動させるには，3個以上のエネルギー準位を利用する必要がある．

次に，レーザーの光子系を記述する方程式を導く．すぐあとで示されるように，(6.21)の右辺は，原子の位置 $\boldsymbol{R}_j$ に無関係に，すべての原子に対して同形になるので，(6.21)は，

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}}{\mathrm{d}t}=N\left(\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}}{\mathrm{d}t}+\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}}{\mathrm{d}t}\right) \tag{6.32}$$

と書いてよい．これが，別々の位置にある原子から放射される光の位相がそろう原因である．光子系に対しては，(6.19)の第1式と第2式が成立するので，これを用いると，(6.32)は

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}}{\mathrm{d}t}=-N\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\left[\sqrt{n+1}\,\rho_{n+1,m}{}^{\mathrm{b,a}}(i)\mathrm{e}^{i\phi_i}+\sqrt{m+1}\,\rho_{n,m+1}{}^{\mathrm{a,b}}(i)\mathrm{e}^{-i\phi_i}\right]$$
$$+N\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\left[\sqrt{n}\,\rho_{n-1,m}{}^{\mathrm{a,b}}(i)\mathrm{e}^{-i\phi_i}+\sqrt{m}\,\rho_{n,m-1}{}^{\mathrm{b,a}}(i)\mathrm{e}^{i\phi_i}\right].$$

この方程式の右辺に(6.28)の定常解を代入し，さらに(6.26)に与えた光子のロスの効果を表わす項を追加すると

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}}{\mathrm{d}t}=&-2\kappa\left(\frac{n+m}{2}\right)\rho_{n,m}+2\kappa\sqrt{(n+1)(m+1)}\,\rho_{n+1,m+1}\\&+NB_0\left[\sqrt{(n+1)(m+1)}\,\rho_{n+1,m+1}{}^{\mathrm{b,b}}+\sqrt{nm}\,\rho_{n-1,m-1}{}^{\mathrm{a,a}}\right]\\&-\frac{1}{2}NB_0[(n+1)+(m+1)]\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}-\frac{1}{2}NB_0(n+m)\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}\end{aligned} \tag{6.33}$$

がえられる．この(6.33)の方程式が光子系を記述する基本方程式である．なお，この方程式の右辺は，位相 ϕ_i に，したがって原子の位置 $\boldsymbol{R}_i$ には無関係になっている．

(4)　レーザー光の性質

(6.33)の方程式にもとづいて，レーザー装置から放出される光の性質を調べよう．まず光子数分布を調べるため，(6.33)の光子の密度行列の対角要素 $\rho_{n,n}$ をとる．そして右辺に(6.30)を代入すると

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n,n}}{\mathrm{d}t} = n\left[-C\rho_{n,n}+\frac{\alpha\beta}{\beta+n}\rho_{n-1,n-1}\right]-(n+1)\left[-C\rho_{n+1,n+1}+\frac{\alpha\beta}{\beta+(n+1)}\rho_{n,n}\right] \tag{6.34}$$

となる．ここで

$$\alpha = N\lambda_{\mathrm{a}}B_0/\gamma_{\mathrm{a}}, \qquad \beta = \gamma_{\mathrm{a}}\gamma_{\mathrm{b}}/2\gamma B_0, \qquad C = 2\kappa \tag{6.35}$$

とおいた．α はポンピングのパラメーター λ_{a} を含み，この値は外部からの操作によって調節することができる．β は 3×10^7 程度の大きい値をもつ無次元の定数である．また光子のロスを与えるパラメーター C は $10^6\,\mathrm{s}^{-1}$ の程度の大きさの量である．

ここで，光子の分布数を決定する(6.34)の方程式を用いて，光子の平均数 $\bar{n}=\sum_{n=0}^{\infty} n\rho_{n,n}$ のみたす方程式を求めておこう．$\bar{n}$ を微分して(6.34)を用いると

$$\frac{\mathrm{d}\bar{n}}{\mathrm{d}t} = -\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha\beta(n+1)}{\beta+(n+1)}n\rho_{n,n}+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\alpha\beta n^2}{\beta+n}\rho_{n-1,n-1}$$
$$-C\sum_{n=0}^{\infty}n^2\rho_{n,n}+C\sum_{n=0}^{\infty}n(n+1)\rho_{n+1,n+1}$$

となる．右辺の第2項で $n-1\to n$，第4項で $n+1\to n$ とおきかえると

$$\frac{\mathrm{d}\bar{n}}{\mathrm{d}t} = -C\sum_{n=0}^{\infty}n\rho_{n,n}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha\beta(n+1)}{\beta+(n+1)}\rho_{n,n}$$
$$= -C\bar{n}+\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha\beta(n+1)}{\beta+(n+1)}\rho_{n,n}$$

となる．ここで右辺の第2項を

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{n+1}{\beta+(n+1)}\rho_{n,n} \cong \frac{\bar{n}}{\beta+\bar{n}}$$

と近似すると，

$$\frac{\mathrm{d}\bar{n}}{\mathrm{d}t} = \frac{\beta(\alpha-C)-C\bar{n}}{\beta+\bar{n}}\cdot\bar{n} \tag{6.36}$$

となる．この方程式はレーザー系をもっとも素朴なレート方程式で記述したときにえられる方程式に一致している．ここで光子の定常状態を考えて，$\mathrm{d}\bar{n}/\mathrm{d}t=0$ とする．すると $\alpha<C$，すなわちポンピングが光子のロスよりも小さいとき，$\bar{n}=0$ である．逆に，$\alpha>C$ のとき，$\bar{n}=\beta\left(\frac{\alpha}{C}-1\right)$ で与えられる．すなわち，

光が増幅されるか否かのしきい値は $\alpha=C$ である．

(6.34)の方程式が，レート方程式にもとづく(6.36)よりも優れている点は，光子数のその平均値からのずれの分布が計算できることである．定常状態における(6.34)の解は

$$\rho_{n+1,n+1}=\frac{(\alpha\beta/C)}{\beta+(n+1)}\rho_{n,n}$$

で与えられる．これより

$$\rho_{n,n}=\frac{(\alpha\beta/C)^n\beta!}{(\beta+n)!}\rho_{0,0} \tag{6.37}$$

である．β は 3×10^7 程度の大きな数値であるから，しきい値以下 $(\alpha/C<1)$ のとき，(6.37)の分母は $(\beta+n)!=\beta!(\beta+1)(\beta+2)\cdots(\beta+n)\cong\beta!\beta^n$ と近似することができる．このとき，$\rho_{n,n}=(\alpha/C)^n\rho_{0,0}$ となる．定数 $\rho_{0,0}$ は $\sum_{n=0}^{\infty}\rho_{n,n}=1$ の条件より，$\rho_{0,0}=1-(\alpha/C)$ と決まる．これより平均光子数は(6.36)のときと違って0ではなく

$$\bar{n}=\sum_{n=0}^{\infty}n\left(\frac{\alpha}{C}\right)^n\rho_{0,0}=\frac{(\alpha/C)}{1-(\alpha/C)} \tag{6.38}$$

である．ここで $\rho_{n,n}=(\alpha/C)^n\rho_{0,0}$ を(6.38)の平均数 $\bar{n}$ で表わすと

$$\rho_{n,n}=\frac{\bar{n}^n}{(1+\bar{n})^{n+1}} \tag{6.39}$$

となる．この光子数分布は，第2章(9.47)で与えた無秩序型の分布である．

次に $(\alpha/C)\gg1$ で，しきい値以上のときには，$n\gg\beta$ と考えてよい．このとき，$(\beta+n)!=(\beta+n)(\beta+n-1)\cdots(\beta+1)\beta!\cong n!\beta!$ と近似することができる．したがって(6.37)は

$$\rho_{n,n}=\frac{(\alpha\beta/C)^n}{n!}\rho_{0,0}$$

である．規格化条件より $\rho_{0,0}=\exp[-(\alpha\beta/C)]$ となるから

$$\rho_{n,n}=\frac{(\alpha\beta/C)^n}{n!}e^{-(\alpha\beta/C)} \tag{6.40}$$

をえる．このときの光子の平均数は $\bar{n}=\sum_n n\rho_{n,n}=(\alpha\beta/C)$ で与えられる．これを(6.40)に代入すると

$$\rho_{n,n} = \frac{\bar{n}^n}{n!} e^{-\bar{n}} \tag{6.41}$$

と表わされる．これは第2章(9.61)のコヒーレント状態における Poisson 分布にほかならない．

最後に，レーザー光の位相を調べるために，(6.33)の方程式の非対角項を調べよう．光子系に比して，原子系はすみやかに定常状態に達する．その原子系の定常状態では，(6.29)の左辺を0とおくことにより

$$\begin{aligned} \rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}} &\cong \frac{\lambda_{\mathrm{a}}[\gamma_{\mathrm{b}}+B_0(n+m+2)/2]}{\gamma_{\mathrm{a}}\gamma_{\mathrm{b}}+\gamma B_0(n+m+2)}\rho_{n,m}, \\ \rho_{n+1,m+1}{}^{\mathrm{b,b}} &\cong \frac{\lambda_{\mathrm{a}}B_0\sqrt{(n+1)(m+1)}}{\gamma_{\mathrm{a}}\gamma_{\mathrm{b}}+\gamma B_0(n+m+2)}\rho_{n,m} \end{aligned} \tag{6.42}$$

である．ここで分母に現われる相互作用定数 B_0 の2次の項を無視している．(6.42)を(6.33)に代入して，$m=n-1$ とおくと，

$$\begin{aligned} \frac{1}{C}\frac{\mathrm{d}\rho_{n,n-1}}{\mathrm{d}t} = &-\left(n-\frac{1}{2}\right)\rho_{n,n-1}+\sqrt{n(n+1)}\,\rho_{n+1,n} \\ &-\frac{(\alpha\beta/C)(n+1/2)}{\beta+(n+1/2)}\rho_{n,n-1}+\frac{(\alpha\beta/C)\sqrt{n(n-1)}}{\beta+(n-1/2)}\rho_{n-1,n-2} \end{aligned} \tag{6.43}$$

がえられる．まず，しきい値以下 ($\alpha/C<1$) のときを考えよう．このときは(6.43)の右辺の分母で ($n\pm1/2$) が β に比べて小さいとして，この因子を無視する．すると，方程式から定数 β が消えてしまう．そこで方程式の解の形が

$$\rho_{n,m}(t) = (\alpha/C)^{(n+m)/2}T_{|n-m|}(t)$$

で与えられると仮定し，また $\sqrt{n(n\pm1)}\cong n\pm1/2-(1/8n)$ と近似すると，

$$\frac{1}{C}\frac{\mathrm{d}\rho_{n,n-1}}{\mathrm{d}t} \cong -\frac{1}{8n}\left(1+\frac{\alpha}{C}\right)\rho_{n,n-1} \cong -\frac{1}{8}\left(\frac{C}{\alpha}\right)\rho_{n,n-1} \tag{6.44}$$

となる．ここで2番目の等号では，n をその平均値 $\bar{n}\cong(\alpha/C)(1+\alpha/C)$ でおきかえている．(6.44)より

$$\rho_{n,n-1}(t) = K\left(\frac{\alpha}{C}\right)^{n-1/2} e^{-\frac{C}{8}\left(\frac{C}{\alpha}\right)t} \tag{6.45}$$

をえる．K は積分定数である．ここで $C\cong10^6\,\mathrm{s}^{-1}$ とすると，(6.45)の非対角

要素は10^{-5} sの程度の時間の後には消失する．すなわち

$$\langle\!\langle n\rangle\!\rangle = \mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{a}^{\dagger}\hat{a}) = \sum_{n} n\,\rho_{n,n} \cong (\alpha/C) \neq 0$$

であるのに，$\langle\!\langle\hat{a}\rangle\!\rangle=\mathrm{tr}(\hat{\rho}\hat{a})=\sum_{n}\sqrt{n}\rho_{n,n-1}\to 0$ ということは，$\langle\!\langle\hat{a}\rangle\!\rangle$の位相が$10^{-5}$ s程度の時間で$0\sim2\pi$の間に一様に拡散してしまうことを意味している．

次にしきい値以上（$\alpha/C\gg1$）のときには，$\bar{n}\gg\beta$であるから，(6.43)の右辺の分母のβを無視できる．このときも解の形を

$$\rho_{n,m}(t) = \frac{(\alpha\beta/C)^{(n+m)/2}}{\sqrt{n!m!}}T_{|n-m|}(t)$$

と仮定し，$(n^2-n)/(n-1/2)\cong n-1/2-1/4n$ と近似して，nをその平均数$\bar{n}=(\alpha\beta/C)$でおきかえると，(6.43)は

$$\frac{1}{C}\frac{\mathrm{d}\rho_{n,n-1}}{\mathrm{d}t} = -\frac{C}{4\alpha\beta}\rho_{n,n-1}$$

と近似される．この方程式の解は

$$\rho_{n,n-1}(t) \cong \frac{\bar{n}^{(n-1/2)}}{\sqrt{n!(n-1)!}}\mathrm{e}^{-\bar{n}}\times\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}\left(\frac{C}{\beta}\right)\left(\frac{C}{\alpha}\right)t} \qquad (6.46)$$

で与えられる．これを(6.45)のしきい値以下のときの解と比較すると，指数の分母に$\beta\sim3\times10^{7}$の因子が余分に存在している．そこで仮に$\alpha/C\sim5$，$\beta/C\sim30$ sととると，(6.46)の非対角要素の寿命は10分程度の大きさになる．これは，しきい値以下のときの10^{-5} sに比べて桁ちがいに長い時間である．このことは，しきい値以上のレーザー光の位相が実質的に一定に保たれることを意味する．

(6.46)の性質は，一般の非対角要素$\rho_{n,m}$に対しても成立する．そこで近似的に(6.46)の指数関数を無視すると

$$\rho_{n,m} = \frac{\bar{n}^{(n+m)/2}}{\sqrt{n!m!}}\mathrm{e}^{-\bar{n}}\,; \qquad \bar{n} = \frac{\alpha\beta}{C} \qquad (6.47)$$

と表わされる．これは，第2章(9.60)のコヒーレント状態の密度行列にほかならない．

ここで，(6.12)の

$$\langle m|\hat{a}|n\rangle = \mathrm{e}^{i\delta}\sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}, \qquad \langle m|\hat{a}^{\dagger}|n\rangle = \mathrm{e}^{-i\delta}\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}$$

を利用すると，平均値$\langle\!\langle \hat{a} \rangle\!\rangle$と$\langle\!\langle \hat{a}^\dagger \rangle\!\rangle$とは，それぞれ

$$\langle\!\langle \hat{a} \rangle\!\rangle = \sum_{n,m} \langle n|\hat{\rho}|m\rangle\langle m|\hat{a}|n\rangle = \sum_{n} \langle n|\hat{\rho}|n-1\rangle\sqrt{n}\,\mathrm{e}^{i\delta},$$

$$\langle\!\langle \hat{a}^\dagger \rangle\!\rangle = \sum_{n,m} \langle n|\hat{\rho}|m\rangle\langle m|\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sum_{n} \langle n|\hat{\rho}|n+1\rangle\sqrt{n+1}\,\mathrm{e}^{-i\delta}$$

で与えられる．ここで(6.47)を用いると

$$\sum_n \langle n|\hat{\rho}|n-1\rangle\sqrt{n} = \sum_n \rho_{n,n-1}\sqrt{n} = \sqrt{\bar{n}},$$

$$\sum_n \langle n|\hat{\rho}|n+1\rangle\sqrt{n+1} = \sum_n \rho_{n,n+1}\sqrt{n+1} = \sqrt{\bar{n}}$$

となる．ここで$\bar{n}=\alpha\beta/C$である．これより

$$\langle\!\langle \hat{a} \rangle\!\rangle = \sqrt{\bar{n}}\,\mathrm{e}^{i\delta}, \qquad \langle\!\langle \hat{a}^\dagger \rangle\!\rangle = \sqrt{\bar{n}}\,\mathrm{e}^{-i\delta}.$$

したがって，しきい値以上でレーザーから放射される電波の平均値は

$$\begin{aligned}\langle\!\langle E_z(x,t) \rangle\!\rangle &= iE[\langle\!\langle \hat{a} \rangle\!\rangle \mathrm{e}^{i(kx-\omega t)} - \langle\!\langle \hat{a}^\dagger \rangle\!\rangle \mathrm{e}^{-i(kx-\omega t)}] \\ &= -2\sqrt{\frac{\hbar\omega_k}{2\varepsilon_0 L^3}}\sqrt{\frac{\alpha\beta}{C}}\sin(kx-\omega t+\delta) \qquad (6.48)\end{aligned}$$

で与えられる．これは$\sqrt{\alpha\beta/C}$に比例する振幅と，一定の位相をもつ可干渉な光波を表わしている．

問題の解答

問 1　運動量保存則より $\boldsymbol{p}^2=\hbar^2(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')^2=\hbar^2(k^2+k'^2-2kk'\cos\theta)=(\hbar/c)^2[\omega^2+\omega'^2-2\omega\omega'\cos\theta]$，またエネルギー保存則より $c^2p^2+m^2c^4=m^2c^4+2mc^2(\hbar\omega-\hbar\omega')+(\hbar\omega-\hbar\omega')^2$．これらから p^2 を消去すると，$(1/\omega')-(1/\omega)=(\hbar/mc^2)(1-\cos\theta)$ となる．そこで $\omega=c/\lambda\!\!\!{}^-$，$\omega'=c/\lambda\!\!\!{}^-{}'$ とおくと，$\Delta\lambda\!\!\!{}^-=\lambda\!\!\!{}^-{}'-\lambda\!\!\!{}^-=(\hbar/mc)(1-\cos\theta)$．

問 2　高エネルギー準位 E_2 の原子が速度 $\boldsymbol{v}$ で運動しながら，エネルギー $\hbar\omega$，運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ の光子を 1 個放出し，低エネルギー準位 E_1 に落ちて，速度 $\boldsymbol{v}'$ になるとする．このとき，エネルギー・運動量保存則は

$$E_2+\frac{1}{2}Mv^2=E_1+\frac{1}{2}Mv'^2+\hbar\omega,\qquad M\boldsymbol{v}=M\boldsymbol{v}'+\hbar\boldsymbol{k}.$$

ここで $\hbar\omega_0\equiv E_2-E_1$ とおくと，それぞれの保存則より

$$\hbar\omega_0=\hbar\omega+\frac{1}{2}M(v'^2-v^2),\qquad v'^2-v^2=\hbar^2k^2/M^2-2\hbar\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}/M.$$

これらから v' を消去すると

$$\hbar\omega_0=\hbar\omega+\hbar^2k^2/2M-\hbar\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}.$$

ここで $\boldsymbol{k}=(0,0,k)$ ととると，$\omega_0=\omega-\omega v_z/c+(\hbar\omega/2Mc^2)\cdot\omega$ となる．$Mc^2\gg\hbar\omega$ なので第 3 項を無視すると，$\omega=\omega_0/(1-v_z/c)\cong\omega_0(1+v_z/c)$ をえる．この角振動数の変化を Doppler シフトという．これより，$v_z=c(\omega-\omega_0)/\omega_0$．したがって，$\mathrm{d}v_z=c\,\mathrm{d}\omega/\omega_0$．一方，原子の z 方向の運動に関する Maxwell の速度分布は

$$\mathrm{e}^{-\beta Mv_z^2/2}\,\mathrm{d}v_z=\mathrm{e}^{-\beta Mc^2(\omega-\omega_0)^2/2\omega_0^2}\,c\,\mathrm{d}\omega/\omega_0$$

と表わされる．すなわち，放射される光のスペクトル分布は Gauss 型で，$\omega=\omega_0$ に最大値をもつ．ここで $(\omega-\omega_0)=\Delta/2$ とおくと，$1/2=\exp[-\beta Mc^2(\Delta/2)^2/2\omega_0^2]$ より，

$$\Delta=2\omega_0\sqrt{2\log 2/\beta Mc^2}.$$

問 3　粒子の運動量 $\boldsymbol{p}=m\boldsymbol{v}$ の境界面に平行な成分は保存され，$p\sin\theta=p'\sin\theta'$ であ

る．これより屈折の法則

$$\sin\theta/\sin\theta' = p'/p = v'/v \tag{1}$$

をえる．一方，粒子を物質波とみたとき，それらの位相速度は，境界面の両側でそれぞれ

$$v_p = \omega/k = \hbar\omega/\hbar k = E/p, \quad v_p' = \omega/k' = \hbar\omega/\hbar k' = E/p' \tag{2}$$

である．ここで角振動数 ω は境界面の両側で同じ値をもつことに注意する．これは，粒子像ではエネルギー保存則を表わしている．(2)より

$$v_p/v_p' = (E/p)/(E/p') = p'/p = v'/v \tag{3}$$

である．(1)と(3)より，$\sin\theta/\sin\theta'=v'/v=v_p/v_p'$ をえる．

19 世紀の中頃，光の本質に関して粒子説と波動説が対立していた．当時はまだ波の位相速度 v_p と群速度 v_g の区別がはっきりしていなかった．空気に対する水の屈折率 $n=\sin\theta/\sin\theta'$ は 1 よりも大きい．光の粒子説では $n=v'/v$ であり，波動説では $n=v/v'$ であるとして，空気中の光の速さ v と水中の光の速さ v' の大きさを比較して，$v'>v$ なら粒子説，$v'<v$ なら波動説が正しいと判定できると考えて，水中の光の速さ v'（実は位相速度 v_p'）を測定した．その結果 $v'<v$ であったことから，波動説が正しいと結論した．しかし，上述のように，群速度 v_g（＝粒子の速度）と位相速度 v_p を区別すれば，上の結論が誤りであることが分かる．

問 4　同一のエネルギー固有値 E に対して，2 個の固有関数 ϕ_1 と ϕ_2 があると仮定すると

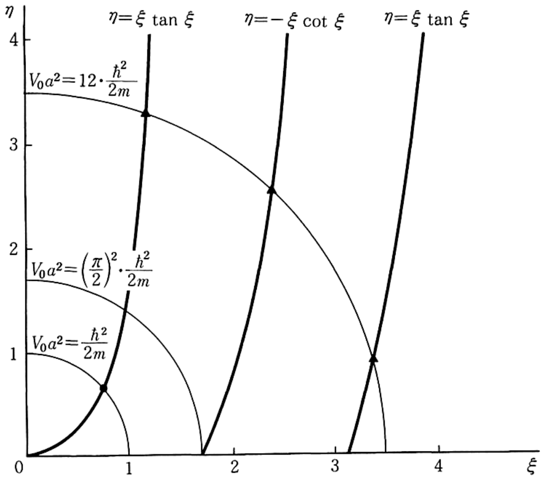
$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V\right]\phi_1(x) = E\phi_1(x), \quad \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+V\right]\phi_2(x) = E\phi_2(x)$$

である．第 1 式に ϕ_2，第 2 式に ϕ_1 を掛けて引き算をすると，

$$\phi_2\frac{\mathrm{d}^2\phi_1}{\mathrm{d}x^2}-\phi_1\frac{\mathrm{d}^2\phi_2}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\phi_2\frac{\mathrm{d}\phi_1}{\mathrm{d}x}-\phi_1\frac{\mathrm{d}\phi_2}{\mathrm{d}x}\right] = 0$$

となる．積分定数を c とすると，$\phi_2\mathrm{d}\phi_1/\mathrm{d}x-\phi_1\mathrm{d}\phi_2/\mathrm{d}x=c$．束縛状態では $\phi_1(x=\pm\infty)=\phi_2(x=\pm\infty)=0$ であるから，$c=0$ である．したがって，$(\mathrm{d}\phi_1/\mathrm{d}x)/\phi_1=(\mathrm{d}\phi_2/\mathrm{d}x)/\phi_2$．あるいは $\mathrm{d}\log\phi_1/\mathrm{d}x=\mathrm{d}\log\phi_2/\mathrm{d}x$ である．これより，$\log\phi_2=\log\phi_1+\log A$．$A$ は任意の積分定数である．これより $\phi_2=A\phi_1$ となる．すなわち，ϕ_2 は ϕ_1 の定数倍で，これは同一の状態である．

問 5　解答図（問 5）は(5.10)と(5.13)のグラフである．$2mV_0a^2/\hbar^2=1$ のときには，パリティー正の解が 1 個だけ，パリティー負の解はない．$2mV_0a^2/\hbar^2=12$ のとき，パリティー正の解が 2 個，負の解が 1 個ある．



解答図(問5)

問6　$x<0$ で $-(\hbar^2/2m)\mathrm{d}^2\phi/\mathrm{d}x^2=(E+V_0)\phi$，$x>0$ で $-(\hbar^2/2m)\mathrm{d}^2\phi/\mathrm{d}x^2=E\phi$. $0>E>-V_0$ のとき，$k=\sqrt{2m(E+V_0)/\hbar^2}$，$\alpha=\sqrt{2m|E|/\hbar^2}$ とおくと，領域 I $(x<0)$ と領域 II $(x>0)$ で

$$\phi_{\mathrm{I}}(x)=A\mathrm{e}^{ikx}+B\mathrm{e}^{-ikx},\qquad \phi_{\mathrm{II}}(x)=C\mathrm{e}^{-\alpha x}.$$

$x=0$ での $\phi(x)$ と $\mathrm{d}\phi/\mathrm{d}x$ の連続性より，$A+B=C$，$ik(A-B)=-\alpha C$. これより $B/A=(k-i\alpha)/(k+i\alpha)$，$C/A=2k/(k+i\alpha)$ をえる．一方，確率の流れの密度は，それぞれ

$$j_{\mathrm{I}}=\frac{\hbar}{2mi}[\phi_{\mathrm{I}}^*\mathrm{d}\phi_{\mathrm{I}}/\mathrm{d}x-\phi_{\mathrm{I}}\mathrm{d}\phi_{\mathrm{I}}^*/\mathrm{d}x]=v[|A|^2-|B|^2]\,;\qquad j_{\mathrm{II}}=0$$

である．ここで $v=\hbar k/m$. これより，

$$j(\text{入射波})=v|A|^2,\qquad j(\text{反射波})=-v|B|^2,\qquad j(\text{透過波})=0.$$

したがって，反射率 R，透過率 T はそれぞれ

$$R=\frac{j(\text{反射波})}{j(\text{入射波})}=\left|\frac{B}{A}\right|^2=\frac{(k-i\alpha)(k+i\alpha)}{(k+i\alpha)(k-i\alpha)}=1,\qquad T=\frac{j(\text{透過波})}{j(\text{入射波})}=0.$$

次に $E>0$ のときは，$k'=\sqrt{2mE/\hbar^2}$ とおくと

$$\phi_{\mathrm{I}}(x)=A\mathrm{e}^{ikx}+B\mathrm{e}^{-ikx},\qquad \phi_{\mathrm{II}}(x)=C\mathrm{e}^{ik'x}.$$

$x=0$ での連続の条件より，$A+B=C$，$ik(A-B)=ik'C$. これらの関係により，$B/A=(k-k')/(k+k')$，$C/A=2k/(k+k')$ となる．$v=\hbar k/m$，$v'=\hbar k'/m$ とおくと，

$$R = \left(\frac{B}{A}\right)^2 = \left(\frac{k-k'}{k+k'}\right)^2 = \left(\frac{\sqrt{E+V_0}-\sqrt{E}}{\sqrt{E+V_0}+\sqrt{E}}\right)^2,$$

$$T = \left(\frac{C}{A}\right)^2 \cdot \frac{v'}{v} = \frac{4k^2}{(k+k')^2}\cdot\frac{k'}{k} = \frac{4\sqrt{E(E+V_0)}}{(\sqrt{E+V_0}+\sqrt{E})^2}.$$

問 7　(1)　$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)\mathrm{d}x = f(0)$ において，$f(x)=x$ とおけば，$\int_{-\infty}^{\infty} x\delta(x)\mathrm{d}x = 0.$ $x \neq 0$ では $x\delta(x)=0$．したがって，$x=0$ でも $x\delta(x)=0$.

(2)　$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(ax)\mathrm{d}x = a^{-1}\int_{-\infty}^{\infty} f(y/a)\delta(y)\mathrm{d}y = a^{-1}f(0).$

一方，$a^{-1}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)\mathrm{d}x = a^{-1}f(0)$．よって，$\delta(ax)=a^{-1}\delta(x)$.

(3)　$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x^2-a^2)\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta((x+a)(x-a))\mathrm{d}x$

$$= \int_{0}^{\infty} f(x)\delta((x+a)(x-a))\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{0} f(x)\delta((x+a)(x-a))\mathrm{d}x.$$

第 1 項の積分できくのは $x=a$，第 2 項は $x=-a$ のときのみである．よって

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x^2-a^2)\mathrm{d}x = \int_{0}^{\infty} f(x)\delta(2a(x-a))\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{0} f(x)\delta(2a(x+a))\mathrm{d}x$$

$$= \frac{1}{2a}\left[\int_{0}^{\infty} f(x)\delta(x-a)\mathrm{d}x + \int_{-\infty}^{0} f(x)\delta(x+a)\mathrm{d}x\right] = \frac{1}{2a}\int_{-\infty}^{\infty} f(x)[\delta(x-a)+\delta(x+a)]\mathrm{d}x.$$

これより，$\delta(x^2-a^2)=(2a)^{-1}[\delta(x-a)+\delta(x+a)]$.

(4)　$\delta(x)$ は偶関数，その微係数は奇関数．よって，$\delta'(-x)=-\delta'(x)$.

(5)　$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)x\delta'(x)\mathrm{d}x = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(f(x)x\right)\Big|_{x=0} = -\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}x\Big|_{x=0} - f(x)\Big|_{x=0} = -f(0).$

一方，$-\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x)\mathrm{d}x = -f(0)$．よって，$x\delta'(x)=-\delta(x)$.

問 8　Fourier 変換 $\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\phi(\boldsymbol{k})\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3k$ より，$\triangle\phi(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\boldsymbol{k}^2\phi(\boldsymbol{k})$ $\times\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3k$．一方，$\delta^3(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3k$．これらを $\triangle\phi(\boldsymbol{r}) = -\delta^3(\boldsymbol{r})$ に代入して，係数を比較すると，$\phi(\boldsymbol{k})=1/k^2$．これを上の Fourier 変換に代入すれば

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}}{k^2}\mathrm{d}^3k.$$

ここでベクトル $\boldsymbol{r}$ の方向を z 軸にとって，極座標系を用いる．このとき，$\boldsymbol{k}$ の各成分は $\boldsymbol{k}=(k\sin\theta\cos\varphi,\ k\sin\theta\sin\varphi,\ k\cos\theta)$ で与えられる．これより

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^\infty k^2 \mathrm{d}k \int_0^\pi \sin\theta\, \mathrm{d}\theta \cdot \mathrm{e}^{ikr\cos\theta}/k^2 \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi$$

となる．ここで $t=\cos\theta$ とおくと，

$$\phi(\boldsymbol{r}) = \frac{2\pi}{(2\pi)^3}\int_0^\infty \mathrm{d}k \int_{-1}^1 \mathrm{e}^{ikrt}\mathrm{d}t = \frac{4\pi}{(2\pi)^3}\cdot\frac{1}{r}\int_0^\infty \frac{\sin kr}{k}\mathrm{d}k = \frac{4\pi}{(2\pi)^3}\cdot\frac{\pi}{2}\cdot\frac{1}{r} = \frac{1}{4\pi}\cdot\frac{1}{|\boldsymbol{r}|}.$$

ここで $\int_0^\infty \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x = \frac{\pi}{2}$ を用いている．

問 9　エネルギー固有値を決める方程式は

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_1 - E & 0 & a \\ 0 & \varepsilon_2 - E & 0 \\ a^* & 0 & \varepsilon_3 - E \end{vmatrix} = 0$$

である．これより，$(\varepsilon_2 - E)\{(\varepsilon_1 - E)(\varepsilon_3 - E) - |a|^2\} = 0$．したがって

$$E = \frac{1}{2}\left[(\varepsilon_1+\varepsilon_3)-(\varepsilon_3-\varepsilon_1)\sqrt{1+\frac{4|a|^2}{(\varepsilon_3-\varepsilon_1)^2}}\right],\ \varepsilon_2,\ \frac{1}{2}\left[(\varepsilon_1+\varepsilon_3)+(\varepsilon_3-\varepsilon_1)\sqrt{1+\frac{4|a|^2}{(\varepsilon_3-\varepsilon_1)^2}}\right].$$

$(\varepsilon_3 - \varepsilon_1) \gg |a|$ のとき

$$E = \varepsilon_1 - |a|^2/(\varepsilon_3-\varepsilon_1),\ \varepsilon_2,\ \varepsilon_3 + |a|^2/(\varepsilon_3-\varepsilon_1).$$

問 10　(2.21)より，任意の状態 $|\psi\rangle$ に対して $\hat{p}|\psi\rangle = \int |q\rangle \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\langle q|\psi\rangle \mathrm{d}q$ である．ここで完全性 $\int |p\rangle\langle p|\mathrm{d}p = 1$, $\int |q\rangle\langle q|\mathrm{d}q = 1$ を用いると，

$$\hat{p}|\psi\rangle = \int |q\rangle \frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p\mathrm{d}q = (2\pi\hbar)^{-1/2}\int |q\rangle\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q}\mathrm{e}^{ipq/\hbar}\right)\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p\mathrm{d}q$$

$$= (2\pi\hbar)^{-1/2}\int |q\rangle \mathrm{e}^{ipq/\hbar} p\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p\mathrm{d}q = \int |q\rangle\langle q|p\rangle p\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p\mathrm{d}q = \int |p\rangle p\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p.$$

また，

$$\hat{q}|\psi\rangle = \int |q\rangle q\langle q|\psi\rangle \mathrm{d}q = \int |q\rangle q\langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p\mathrm{d}q = (2\pi\hbar)^{-1/2}\int |q\rangle(q\,\mathrm{e}^{ipq/\hbar})\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p\mathrm{d}q$$

$$= (2\pi\hbar)^{-1/2}\int |q\rangle\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\mathrm{e}^{ipq/\hbar}\right)\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p\mathrm{d}q.$$

ここで変数 p に関して部分積分をして，$\psi(p\to\pm\infty) \equiv \langle p\to\pm\infty|\psi\rangle \to 0$ とすると

$$\hat{q}|\psi\rangle = (2\pi\hbar)^{-1/2}\int |q\rangle \mathrm{e}^{ipq/\hbar}\left(i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\langle p|\psi\rangle\right)\mathrm{d}p\mathrm{d}q = \int |q\rangle\langle q|p\rangle i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p\mathrm{d}q$$

$$= \int |p\rangle i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\langle p|\psi\rangle \mathrm{d}p.$$

問 11　不確定性が最小のとき，(3.17)で $I(\alpha)=0$．このとき $\alpha=\hbar/2\overline{(\Delta q)^2}$ である．また(3.17)より $(\alpha\Delta\hat{q}+i\Delta\hat{p})|\psi\rangle=0$．ここで $\bar{p}=\bar{q}=0$ とすると，$(\alpha\hat{q}+i\hat{p})|\psi\rangle=0$．左から $\langle q|$ を掛けて位置表示をとれば，この方程式は $(\alpha q+\hbar \mathrm{d}/\mathrm{d}q)\psi(q)=0$．これにうえの α の値を代入すれば，解は $\psi(q)=A\ \exp[-q^2/2\overline{(\Delta q)^2}]$ である．

問 12　運動量に Δp の不確定さがあると，それに伴って粒子のエネルギーには $\Delta E=(\partial E/\partial p)\Delta p=v\Delta p$ の不確定さがある．ここで $v=\partial E/\partial p$ の関係を用いた．一方，波束が x 軸上の 1 点を通過する時刻の不確定性は $\Delta t\sim\Delta x/v$ である．したがって，

$$\Delta E\cdot\Delta t = v\Delta p\times(\Delta x/v) = \Delta p\cdot\Delta x \sim \hbar/2.$$

問 13　$\hat{U}^{-1}\hat{U}=1$ の両辺を t で微分すると，$(\mathrm{d}\hat{U}^{-1}/\mathrm{d}t)\hat{U}+\hat{U}^{-1}(\mathrm{d}\hat{U}/\mathrm{d}t)=0$．これに右から $\hat{U}^{-1}$ を掛けて移項すると，$\mathrm{d}\hat{U}^{-1}/\mathrm{d}t=-\hat{U}^{-1}(\mathrm{d}\hat{U}/\mathrm{d}t)\hat{U}^{-1}$ をえる．

問 14　c 数のパラメーター ξ を用いて

$$f(\xi) = \mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}} \tag{1}$$

とおき，$f(\xi)$ を ξ のベキ級数に展開すると

$$f(\xi) = f(0)+f'(0)\xi+\frac{1}{2!}f''(0)\xi^2+\cdots \tag{2}$$

である．一方，(1)で $\xi=0$ とおくと，

$$f(0) = B. \tag{3}$$

次に(1)を ξ で微分すると，$\mathrm{d}f(\xi)/\mathrm{d}\xi=\mathrm{d}/\mathrm{d}\xi(\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}})=\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\hat{A}\hat{B}\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}}-\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\hat{B}\hat{A}\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}}=\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}}$．ここで $\xi=0$ とおくと

$$f'(0) = [\hat{A},\hat{B}]. \tag{4}$$

$\mathrm{d}f(\xi)/\mathrm{d}\xi$ をもういちど微分して上の結果を代入すると，$\mathrm{d}^2f(\xi)/\mathrm{d}\xi^2=\mathrm{d}/\mathrm{d}\xi(\mathrm{d}f(\xi)/\mathrm{d}\xi)=\mathrm{d}/\mathrm{d}\xi(\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}[\hat{A},\hat{B}]\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}})=\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]\mathrm{e}^{-\xi\hat{A}}$ となる．ここで $\xi=0$ とおくと，

$$f''(0) = [\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]. \tag{5}$$

(3),(4),(5)を(2)の展開式に代入すると

$$f(\xi) = \hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]\xi+\frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]\xi^2+\cdots. \tag{6}$$

ここで $\xi=1$ とおくと

$$\mathrm{e}^{\hat{A}}\hat{B}\mathrm{e}^{-\hat{A}} = \hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]+\frac{1}{2!}[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]]+\cdots.$$

問 15　$g(\xi)=\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\cdot\mathrm{e}^{\xi\hat{B}}$ とおいて，これを ξ で微分すると，$\mathrm{d}g(\xi)/\mathrm{d}\xi=\hat{A}\mathrm{e}^{\xi\hat{A}}\mathrm{e}^{\xi\hat{B}}+$

$e^{\xi\hat{A}}\hat{B}e^{\xi\hat{B}}=[\hat{A}+e^{\xi\hat{A}}\hat{B}e^{-\xi\hat{A}}]g(\xi)$ となる．問 14 の(6)で $[\hat{A},\hat{B}]=c$ 数のとき，$e^{\xi\hat{A}}\hat{B}e^{-\xi\hat{A}}=\hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]\xi$ である．よって $\mathrm{d}g(\xi)/\mathrm{d}\xi=(\hat{A}+\hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]\xi)g(\xi)$．$g(\xi=0)=1$ に注意して積分すると $g(\xi)=e^{(\hat{A}+\hat{B})\xi+[\hat{A},\hat{B}]\xi^2/2}$ をえる．ここで $\xi=1$ とおくと

$$e^{\hat{A}}\cdot e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]/2}.$$

問 16　(5.58)より

$$\hat{U}(t,0) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\ \hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2)\cdots\hat{V}_I(t_n).$$

これのエルミート共役をとると

$$\hat{U}(0,t) = \hat{U}^\dagger(t,0) = \sum_{n=0}^{\infty}\left(\frac{+i}{\hbar}\right)^n \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\ \hat{V}_I(t_n)\hat{V}_I(t_{n-1})\cdots\hat{V}_I(t_1).$$

これらの展開式を $\hat{F}(t)=\hat{U}(0,t)\hat{F}_I(t)\hat{U}(t,0)$ に代入すると，$\hat{V}_I$ の第 0 次は $\hat{F}_I(t)$，また，第 1 次と第 2 次は，それぞれ

$$\begin{aligned}(\text{第 1 次}) &= \left(\frac{+i}{\hbar}\right)\int_0^t \mathrm{d}t_1\,\hat{V}_I(t_1)\hat{F}_I(t) + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_0^t \mathrm{d}t_1\,\hat{F}_I(t)\hat{V}_I(t_1) \\ &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_0^t \mathrm{d}t_1[\hat{F}_I(t),\,\hat{V}_I(t_1)], \qquad (1)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\text{第 2 次}) &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2\,\hat{V}_I(t_2)\hat{V}_I(t_1)\hat{F}_I(t) \\ &\quad + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_0^t \mathrm{d}t_1\,\hat{V}_I(t_1)\hat{F}_I(t)\int_0^t \mathrm{d}t_1\,\hat{V}_I(t_1) \\ &\quad + \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2\,\hat{F}_I(t)\hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2). \qquad (2)\end{aligned}$$

ここで階段関数を

$$\theta(t) \equiv \begin{cases} 1, & t \geqq 0 \\ 0 & t < 0 \end{cases}$$

で定義すると，$\theta(t)+\theta(-t)=1$ である．これを用いて，(2)の第 2 項を次のように変形する．

$$\begin{aligned}(2)\text{の第 2 項} &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^t \mathrm{d}t_2\{\theta(t_1-t_2)+\theta(t_2-t_1)\}\,\hat{V}_I(t_1)\hat{F}_I(t)\hat{V}_I(t_2) \\ &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^t \mathrm{d}t_2\,\theta(t_1-t_2)\hat{V}_I(t_1)\hat{F}_I(t)\hat{V}_i(t_2) \\ &\quad + \left(\frac{i}{\hbar}\right)\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^t \mathrm{d}t_2\,\theta(t_1-t_2)\hat{V}_I(t_2)\hat{F}_I(t)\hat{V}_I(t_1) \\ &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)\left(\frac{-i}{\hbar}\right)\int_0^t \mathrm{d}t_1\int_0^{t_1}\mathrm{d}t_2\{\hat{V}_I(t_1)\hat{F}_I(t)\hat{V}_I(t_2)+\hat{V}_I(t_2)\hat{F}_I(t)\hat{V}_I(t_1)\}.\end{aligned}$$

ここで1番目の等号では，(2)の第2項の右側の t_1 を t_2 に変え，2番目の等号では第2項で $t_1 \longleftrightarrow t_2$ と変数を交換している．これを(2)に代入すると

$$
\begin{aligned}
(\text{第}2\text{次}) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 \{\hat{F}_I(t)\hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2) + \hat{V}_I(t_2)\hat{V}_I(t_1)\hat{F}_I(t) \\
&\qquad - \hat{V}_I(t_1)\hat{F}_I(t)\hat{V}_I(t_2) - \hat{V}_I(t_2)\hat{F}_I(t)\hat{V}_I(t_1)\} \\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t \mathrm{d}t_1 \int_0^{t_1} \mathrm{d}t_2 [[\hat{F}_I(t), \hat{V}_I(t_1)], \hat{V}_I(t_2)]
\end{aligned}
$$

とまとめられる．第3次もやや複雑ではあるが同様の手法でまとめられる．

問 17　$\overline{x^2} \to x^2$, $\overline{p^2} \to p^2$ と書くと，不確定性関係は $x^2 \cdot p^2 = (\hbar/2)^2$ である．このとき，調和振動子の平均エネルギーは

$$
\bar{H} = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega_0{}^2 x^2 = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega_0{}^2(\hbar/2)^2/p^2
$$

である．これを極小にするため，$\mathrm{d}\bar{H}/\mathrm{d}(p^2) = 0$ とすると，$p^2 = m\hbar\omega_0/2$ となる．これより $x^2 = \hbar^2/4p^2 = \hbar/2m\omega_0$．このときの $\bar{H}$ の値は

$$
\bar{H} = \frac{1}{2m}\left(\frac{m\hbar\omega_0}{2}\right) + \frac{1}{2}m\omega_0{}^2\left(\frac{\hbar}{2m\omega_0}\right) = \frac{1}{2}\hbar\omega_0.
$$

問 18　$n=1$ のとき，(9.36)は

$$
\phi_1(q) = N_1\left[\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right]\mathrm{e}^{-\xi^2/2} = N_1 \cdot 2\xi\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} = N_1(-1)^1\mathrm{e}^{\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\mathrm{e}^{-\xi^2} = N_1 H_1(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}
$$

となるから，(9.38)は $n=1$ のときに成立している．そこで，n のときに(9.38)が正しいと仮定して，$(n+1)$ に対しても(9.38)が成立することを示せばよい．すなわち，(9.36)より

$$
\begin{aligned}
\phi_{n+1} &= \frac{1}{\sqrt{2(n+1)}}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)N_n H_n(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2} = N_{n+1}\left(\xi - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\right)(-1)^n\,\mathrm{e}^{\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2} \\
&= N_{n+1}(-1)^n\left[\xi\mathrm{e}^{\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\xi}\left(\mathrm{e}^{\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2}\right)\right] \\
&= N_{n+1}(-1)^n\left[\xi\mathrm{e}^{\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2} - \xi\mathrm{e}^{\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n}\mathrm{e}^{-\xi^2} - \mathrm{e}^{\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}\xi^{n+1}}\mathrm{e}^{-\xi^2}\right] \\
&= N_{n+1}(-1)^{n+1}\left[\mathrm{e}^{\xi^2/2}\frac{\mathrm{d}^{n+1}}{\mathrm{d}\xi^{n+1}}\mathrm{e}^{-\xi^2}\right] = N_{n+1}H_{n+1}(\xi)\,\mathrm{e}^{-\xi^2/2}.
\end{aligned}
$$

問 19　$\bar{q} = \sqrt{\dfrac{\hbar}{2m\omega_0}}\langle n|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|n\rangle = 0, \qquad \bar{p} = \dfrac{\hbar}{i}\sqrt{\dfrac{m\hbar\omega_0}{2}}\langle n|(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)|n\rangle = 0$

である．また

$$\overline{q^2} = \langle n|\hat{q}^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_0}\langle n|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|n\rangle$$
$$= \frac{\hbar}{2m\omega_0}\langle n|(\hat{a}\hat{a}+\hat{a}^\dagger\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger)|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega_0}\langle n|(2\hat{a}^\dagger\hat{a}+1)|n\rangle$$
$$= \frac{\hbar}{2m\omega_0}(2n+1),$$
$$\overline{p^2} = \langle n|\hat{p}^2|n\rangle = -\frac{m\hbar\omega_0}{2}\langle n|(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)|n\rangle$$
$$= -\frac{m\hbar\omega_0}{2}\langle n|(\hat{a}\hat{a}-\hat{a}^\dagger\hat{a}-\hat{a}\hat{a}^\dagger+\hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger)|n\rangle = \frac{m\hbar\omega_0}{2}\langle n|(2\hat{a}^\dagger\hat{a}+1)|n\rangle$$
$$= \frac{m\hbar\omega_0}{2}(2n+1).$$

したがって，$\sqrt{\overline{(\Delta q)^2}\cdot\overline{(\Delta p)^2}} = \sqrt{(\hbar^2/4)(2n+1)^2} = \hbar(n+1/2)$.

問 20　Lagrange の未定係数 α と β を用いて

$$I = -\sum_{n=0}^{\infty} P_n \log P_n + \beta\left(\bar{n} - \sum_{n=0}^{\infty} nP_n\right) + \alpha\left(1-\sum_{n=0}^{\infty} P_n\right)$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} P_n[-\log P_n - \beta n - \alpha] + \beta\bar{n} + \alpha$$

が極値をとるように P_n を決める．そこで $\mathrm{d}I/\mathrm{d}P_n=0$ とすると，$\log P_n = -(1+\alpha)-\beta n$ となる．これより $P_n = C\mathrm{e}^{-\beta n}$．ここで $C=\mathrm{e}^{-(1+\alpha)}$，$\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1$ の条件より，$C=1-\mathrm{e}^{-\beta}$ と決まる．これを $\bar{n} = \sum_{n=0}^{\infty} nP_n$ に代入すると

$$\bar{n} = (1-\mathrm{e}^{-\beta})\sum_{n=0}^{\infty} n\mathrm{e}^{-\beta n} = -(1-\mathrm{e}^{-\beta})\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\beta}(1-\mathrm{e}^{-\beta})^{-1} = \mathrm{e}^{-\beta}/(1-\mathrm{e}^{-\beta}).$$

したがって，$\mathrm{e}^{-\beta} = \bar{n}/(\bar{n}+1)$．これより

$$P_n = (1-\mathrm{e}^{-\beta})\mathrm{e}^{-\beta n} = \bar{n}^n/(\bar{n}+1)^{n+1}.$$

問 21　$\hat{a} = \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega_0}}(\hat{p}-im\omega_0\hat{q})$ を $\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ に代入して，位置表示をとると，微分方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q} + \frac{m\omega_0}{\hbar}(q-q_0)\right]\psi_\alpha(q) = 0$$

がえられる．ここで $\psi_\alpha(q) = \langle q|\alpha\rangle$，$q_0 = \alpha\sqrt{2\hbar/m\omega_0}$ である．この方程式の解は，$\psi_\alpha(q) = N_0 \exp[-(m\omega_0/2\hbar)(q-q_0)^2]$ で与えられる．

問 22　Schrödinger の固有値方程式は，ポテンシャルの内外でそれぞれ

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u^{in}}{dr^2}-V_0u^{in}=Eu^{in},\qquad -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u^{ex}}{dr^2}=Eu^{ex} \tag{1}$$

である．束縛状態であるから $E<0$．そこで $\alpha=\sqrt{2\mu(V_0-|E|)/\hbar^2}$, $\beta=\sqrt{2\mu|E|/\hbar^2}$ とおくと，

$$\alpha^2+\beta^2=\frac{2\mu V_0}{\hbar^2}. \tag{2}$$

(1)の第1式で $u^{in}(0)=0$ の条件をみたす解は $u^{in}(r)=A\sin\alpha r$, また，第2式で $r\to\infty$ で収束する解は $u^{ex}(r)=Be^{-\beta r}$．$r=a$ における波動関数とその微係数の連続性の条件より，

$$\alpha\cot\alpha a=-\beta. \tag{3}$$

ここで $\xi=\alpha a\geqq 0$, $\eta=\beta a\geqq 0$ とおくと，(2)と(3)の条件式は

$$\xi^2+\eta^2=2\mu V_0a^2/\hbar^2,\qquad \eta=-\xi\cot\xi. \tag{4}$$

これは，問5のパリティーが負のときの解と同じである．問5の解答図には(4)の第2式のグラフがえがかれている．そこで $\eta=0$ ととると，$\xi=\pi/2$．したがって，(4)の第1式の円の半径 $\sqrt{2\mu V_0a^2/\hbar^2}$ が $\pi/2$ よりも小さいとき，$\eta\geqq 0$, $\xi\geqq 0$ の範囲内では二つのグラフの交点がない．すなわち，$V_0a^2<\pi^2\hbar^2/8\mu$ のとき束縛状態はない．

問23　$(M^{(-)})^nY_m=e^{-in\varphi}(\sqrt{1-\xi^2})^{-m+n}\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\{(\sqrt{1-\xi^2})^mY_m\}$ が成立すると仮定したとき，n を $n+1$ におきかえたものが成立すればよい．(2.28)の第2式を用い，$Y_m\propto e^{im\varphi}$ に注意すると

$$\begin{aligned}(M^{(-)})^{n+1}Y_m&=M^{(-)}\{(M^{(-)})^nY_m\}\\&=e^{-i\varphi}\left[\sqrt{1-\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}-\frac{\xi}{\sqrt{1-\xi^2}}\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right]\left[e^{-in\varphi}(\sqrt{1-\xi^2})^{-m+n}\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\{(\sqrt{1-\xi^2})^mY_m\}\right]\\&=e^{-i(n+1)\varphi}\left[\sqrt{1-\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}+\frac{\xi(n-m)}{\sqrt{1-\xi^2}}\right]\left[(\sqrt{1-\xi^2})^{-m+n}\frac{\partial^n}{\partial\xi^n}\{(\sqrt{1-\xi^2})^mY_m\}\right]\\&=e^{-i(n+1)\varphi}(\sqrt{1-\xi^2})^{-m+n+1}\frac{\partial^{n+1}}{\partial\xi^{n+1}}\{(\sqrt{1-\xi^2})^mY_m\}.\end{aligned}$$

ここで，最後から2番目の表式の微分 $\partial/\partial\xi$ を実行するとき，$(\sqrt{1-\xi^2})^{-m+n}$ を微分した部分は，次の $[\xi(n-m)/\sqrt{1-\xi^2}]$ の部分からの寄与と相殺する．

問24　空間座標の反転 $x\to-x$, $y\to-y$, $z\to-z$ は，極座標系では $r\to r$, $\theta\to\pi-\theta$, $\varphi\to\pi+\varphi$ で与えられる．$Y_{l,m}$ のうち $e^{im\varphi}$ の因子は $e^{im(\pi+\varphi)}=(-1)^me^{im\varphi}$ であり，また，$\xi'=\cos(\theta-\pi)=-\cos\theta=-\xi$ であるから，

$$\frac{d^{l-m}}{d\xi'^{l-m}}(1-\xi'^2)^l=+(-1)^{l-m}\frac{d^{l-m}}{d\xi^{l-m}}(1-\xi^2)^l.$$

したがって，

$$Y_{l,m}(\pi-\theta,\pi+\varphi)=(-1)^m\cdot(-1)^{l-m}Y_{l,m}(\theta,\varphi)=(-1)^l Y_{l,m}(\theta,\varphi).$$

すなわち，固有値 l の状態のパリティーは m によらず，$(-1)^l$ である．

問25　(1.30)より

$$M_x=-\frac{1}{i}\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}+\cos\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right),\qquad M_y=\frac{1}{i}\left(\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta}-\sin\varphi\cot\theta\frac{\partial}{\partial\varphi}\right).$$

これらを問題に与えた $\mathcal{X}_{1,0}$, $\mathcal{X}_{1,\pm1}$ および $\mathcal{Y}_{1,0}$, $\mathcal{Y}_{1,\pm1}$ に作用させて微分を実行すると

$$M_x\mathcal{X}_{1,0}=0\cdot\mathcal{X}_{1,0},\qquad M_x\mathcal{X}_{1,\pm1}=\pm1\cdot\mathcal{X}_{1,\pm1},$$
$$M_y\mathcal{Y}_{1,0}=0\cdot\mathcal{Y}_{1,0},\qquad M_y\mathcal{Y}_{1,\pm1}=\pm1\cdot\mathcal{Y}_{1,\pm1}$$

となることが容易に示される．

問26　束縛状態のエネルギー固有値の最大値は $E=0$ である．このとき，ポテンシャルの内側で

$$\frac{\mathrm{d}^2R_l}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r}+\left\{\frac{2mV_0}{\hbar^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R_l=0\;;\qquad r\leqq a.$$

$\alpha=\sqrt{2mV_0/\hbar^2}$ とおくと，この方程式の原点で有界な解は $R_l\propto j_l(\alpha r)$ である．$j_l(\rho)$ の定義(3.12)より，公式

$$\frac{\mathrm{d}j_l(\rho)}{\mathrm{d}\rho}=\frac{1}{2l+1}[lj_{l-1}(\rho)-(l+1)j_{l+1}(\rho)],\qquad j_{l+1}(\rho)=\frac{2l+1}{\rho}j_l(\rho)-j_{l-1}(\rho)$$

をえる．これより

$$\frac{\mathrm{d}j_l(\rho)}{\mathrm{d}\rho}=\frac{l}{2l+1}j_{l-1}(\rho)-\frac{l+1}{2l+1}j_{l+1}(\rho)=j_{l-1}(\rho)-\frac{(l+1)}{\rho}j_l(\rho).$$

したがって，$(\mathrm{d}j_l(\alpha r)/\mathrm{d}r)/j_l(\alpha r)=\alpha j_{l-1}(\alpha r)/j_l(\alpha r)-(l+1)/r$ である．

一方，ポテンシャルの外部では

$$\frac{\mathrm{d}^2R_l}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}R_l}{\mathrm{d}r}-\frac{l(l+1)}{r^2}R_l=0\;;\qquad r>a.$$

この方程式の一般解は $R_l=ar^l+br^{-l-1}$．$R_l(r\to\infty)=0$ の条件より $a=0$．したがって，$(\mathrm{d}R_l/\mathrm{d}r)/R_l=-(l+1)/r$．$r=a$ における対数微分 $(\mathrm{d}R_l/\mathrm{d}r)/R_l$ の連続の条件によって，$j_{l-1}(\alpha a)=0$ をえる．ここで $\alpha a\neq0$ であるから，$j_{l-1}(z)=0$ の 0 以外の根を z とすると，$z=\alpha a=\sqrt{2mV_0/\hbar^2}\cdot a$．これより $V_0a^2=\hbar^2z^2/2m$.

問27　$V(r)=-(e^2/4\pi\varepsilon_0)\mathrm{e}^{-\alpha r}/r$ を(5.22)に代入すると

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2 \cdot \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}} \frac{\mathrm{e}^{-\alpha r}}{r} \mathrm{d}^3 r \right|^2.$$

ここで $\boldsymbol{K}=\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$．$\boldsymbol{K}$ の方向を z 軸とする極座標をとると

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\mathrm{e}^{-\alpha r}/r)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}} \mathrm{d}^3 r = \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\alpha r} r\, \mathrm{d}r \int_0^{\pi} \mathrm{e}^{iKr\cos\theta} \sin\theta\, \mathrm{d}\theta \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi$$
$$= \frac{4\pi}{K} \int_0^{\infty} \sin(Kr)\, \mathrm{e}^{-\alpha r} \mathrm{d}r = \frac{4\pi}{K^2+\alpha^2}.$$

$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}'=k^2\cos\theta$ とおくと，$K^2=2k^2(1-\cos\theta)=4k^2\sin^2(\theta/2)=4(mv/\hbar)^2\sin^2(\theta/2)$．これらを用いると

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \cdot \frac{4m^2}{[4(mv)^2\sin^2(\theta/2)+\hbar^2\alpha^2]^2}$$

をえる．ここで $\alpha\to 0$ の極限をとると，$\sigma(\theta)=\left(\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\cdot\dfrac{1}{2mv^2}\right)^2\Big/\sin^4(\theta/2)$ となる．これは Rutherford 散乱の微分断面積に一致している．ただしこの一致は偶然であって，さらに高次の近似を求めて，$\alpha\to 0$ の極限をとると，その結果は発散する．

問 28　e^{ikz} は Helmholtz の方程式 $(\triangle+k^2)\psi=0$ の z 軸のまわりで対称で，原点 O で有限な解である．一方，この方程式を極座標系を用いて表わし，z 軸のまわりで対称な解を $\psi=R_l(r)P_l(\cos\theta)$ とおくと，R_l のみたす方程式は

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+k^2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l(r) = 0 \tag{1}$$

で与えられる．この方程式の $r=0$ で有界な解は $j_l(kr)$ である．したがって，e^{ikz} は

$$\mathrm{e}^{ikz} = \mathrm{e}^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} A_l j_l(kr) P_l(\cos\theta) \tag{2}$$

と展開できるはずである．この展開は r の値に関係なく成立しなければならないから，ここでは r が小さい値をとって，上式の両辺を比較して係数 A_l を決める．上式の左辺をベキ展開し，右辺で(3.13)を用いると

$$\sum_{l=0}^{\infty} \frac{(ikr\cos\theta)^l}{l!} \cong \sum_{l=0}^{\infty} A_l \frac{(kr)^l}{(2l+1)!!} P_l(\cos\theta).$$

(5.30)より，$P_l(\cos\theta)$ の $\cos\theta$ の最高ベキ $(\cos\theta)^l$ を含む項の係数は $(2l)!/2^l(l!)^2$ で与えられるから，

$$\frac{(ikr\cos\theta)^l}{l!} = A_l \frac{(2l)!}{2^l(l!)^2} \frac{(kr\cos\theta)^l}{(2l+1)!!}$$

である．これより $A_l=i^l(2l+1)$ と決まる．これを(2)に代入したものが Rayleigh の公式である．なお，公式の右辺の $(2l+1)$ の因子は，z 軸のまわりの磁気量子数 m に関

する縮退度を示している.

問 29　$l=0$ の s 波を残すと，Rayleigh の公式において

$$\mathrm{e}^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l(2l+1)j_l(kr)P_l(\cos\theta) \cong j_0(kr)$$
$$= \sin kr/kr = (\mathrm{e}^{ikr}-\mathrm{e}^{-ikr})/2ikr$$

である．このとき，外部解の漸近形は

$$\psi_{r\to\infty} \longrightarrow \mathrm{e}^{ikz}+\frac{f}{r}\mathrm{e}^{ikr} \cong \frac{\mathrm{e}^{ikr}-\mathrm{e}^{-ikr}}{2ikr}+\frac{f}{r}\mathrm{e}^{ikr} = -\frac{1}{2ikr}[\mathrm{e}^{-ikr}-S\mathrm{e}^{ikr}] \tag{1}$$

となる．ここで $S=1+2ikf$ である．s 波の全断面積は

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = 4\pi|f|^2 = \frac{\pi}{k^2}[S-1]^2$$

で与えられる．ここで $u_0=r\psi$ と書くと，(1)より

$$u_0 = -\frac{1}{2ik}[\mathrm{e}^{-ikr}-S\mathrm{e}^{ikr}], \quad \mathrm{d}u_0/\mathrm{d}r = \frac{1}{2}(\mathrm{e}^{-ikr}+S\mathrm{e}^{ikr}).$$

ポテンシャル表面 $r=a$ 上での内部の波動関数の対数微分を $\beta\equiv a(\mathrm{d}u^{\mathrm{in}}/\mathrm{d}r)/u^{\mathrm{in}}|_{r=a}$ とおくと，連続の条件より

$$\beta = \left.\frac{a(\mathrm{d}u_0/\mathrm{d}r)}{u_0}\right|_{r=a} = ika\frac{S\mathrm{e}^{ika}+\mathrm{e}^{-ika}}{S\mathrm{e}^{ika}-\mathrm{e}^{-ika}}$$

である．これより $S=[(\beta+ika)/(\beta-ika)]\mathrm{e}^{-2ika}$ である．また

$$S-1 = \mathrm{e}^{-2ika}\left[\frac{2ika}{\beta-ika}+1-\mathrm{e}^{2ika}\right]. \tag{2}$$

したがって，全断面積は

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = \frac{\pi}{k^2}\left|\frac{2ika}{\beta-ika}+1-\mathrm{e}^{2ika}\right|^2.$$

完全剛体のとき，$r=a$ に無限大の高さの壁があり，そこで $u_0(a)=0$, $\mathrm{d}u_0/\mathrm{d}r(a)<\infty$ であるから，$\beta=\infty$ である．このとき，(2)の右辺の絶対値のなかの第 1 項は消えて，

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = \frac{\pi}{k^2}\left|1-\mathrm{e}^{2ika}\right|^2 = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2 ka \tag{3}$$

となる．$ka\ll 1$ のとき，$\sigma^{\mathrm{tot}}=4\pi a^2$．また，(3)より $|\delta|=ka$ であるが，剛体の壁は斥力であるから δ は負であり，したがって，$\delta=-ka$.

問 30　$j=1$ で $m=1,0,-1$ が可能であるから，$|1,1\rangle=|+\rangle$, $|1,0\rangle=|0\rangle$, $|1,-1\rangle=|-\rangle$ と書くと，(1.4)の第 2 式から

$$\langle + | \hat{J}_z | + \rangle = 1\langle + | + \rangle = 1, \quad \langle + | \hat{J}_z | 0 \rangle = 0\langle + | 0 \rangle = 0,$$
$$\langle + | \hat{J}_z | - \rangle = -\langle + | - \rangle = 0,$$
$$\langle 0 | \hat{J}_z | + \rangle = 1\langle 0 | + \rangle = 0, \quad \langle 0 | \hat{J}_z | 0 \rangle = 0\langle 0 | 0 \rangle = 0,$$
$$\langle 0 | \hat{J}_z | - \rangle = -\langle 0 | - \rangle = 0,$$
$$\langle - | \hat{J}_z | + \rangle = 1\langle - | + \rangle = 0, \quad \langle - | \hat{J}_z | 0 \rangle = 0\langle - | 0 \rangle = 0,$$
$$\langle - | \hat{J}_z | - \rangle = -1\langle - | - \rangle = -1.$$

これより，

$$J_z = \begin{pmatrix} \langle + | \hat{J}_z | + \rangle & \langle + | \hat{J}_z | 0 \rangle & \langle + | \hat{J}_z | - \rangle \\ \langle 0 | \hat{J}_z | + \rangle & \langle 0 | \hat{J}_z | 0 \rangle & \langle 0 | \hat{J}_z | - \rangle \\ \langle - | \hat{J}_z | + \rangle & \langle - | \hat{J}_z | 0 \rangle & \langle - | \hat{J}_z | - \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

次に(1.8)より

$$\begin{aligned} &\hat{J}^{(+)} | + \rangle = 0, \quad &&\hat{J}^{(+)} | 0 \rangle = \sqrt{2} | + \rangle, \quad &&\hat{J}^{(+)} | - \rangle = \sqrt{2} | 0 \rangle, \\ &\hat{J}^{(-)} | + \rangle = \sqrt{2} | 0 \rangle, \quad &&\hat{J}^{(-)} | 0 \rangle = \sqrt{2} | - \rangle, \quad &&\hat{J}^{(-)} | - \rangle = 0 \end{aligned} \tag{2}$$

である．$\hat{J}_x = (\hat{J}^{(+)} + \hat{J}^{(-)})/2$ に注意して(2)を用いると

$$\langle + | \hat{J}_x | + \rangle = 0, \quad \langle + | \hat{J}_x | 0 \rangle = 1/\sqrt{2}, \quad \langle + | \hat{J}_x | - \rangle = 0,$$
$$\langle 0 | \hat{J}_x | + \rangle = 1/\sqrt{2}, \quad \langle 0 | \hat{J}_x | 0 \rangle = 0, \quad \langle 0 | \hat{J}_x | - \rangle = 1/\sqrt{2},$$
$$\langle - | \hat{J}_x | + \rangle = 0, \quad \langle - | \hat{J}_x | 0 \rangle = 1/\sqrt{2}, \quad \langle - | \hat{J}_x | - \rangle = 0.$$

これより

$$J_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3}$$

また同様にして，$\hat{J}_y = (\hat{J}^{(+)} - \hat{J}^{(-)})/2i$ より

$$J_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \tag{4}$$

(1), (3)および(4)より

$$J_x^2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad J_y^2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & 2 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad J_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

これらより，

$$\boldsymbol{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = 2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

問 31　(2.21)と(2.22)で $\alpha = \varphi$, $\beta = \theta$, $\gamma = 0$ とすると，位置ベクトルは

$$x' = x\cos\theta\cos\varphi + y\cos\theta\sin\varphi - z\sin\theta,$$
$$y' = -x\sin\varphi + y\cos\varphi, \qquad (1)$$
$$z' = x\sin\theta\cos\varphi + y\sin\theta\sin\varphi + z\cos\theta$$

と変換される．したがって，$\boldsymbol{L}$ がこれと同じ変換をすることを示せばよい．このとき(2.38)は

$$U(\varphi,\theta,0) = \mathrm{e}^{i\theta L_y/\hbar}\cdot\mathrm{e}^{i\varphi L_z/\hbar}$$

であり，また(2.17)より

$$\boldsymbol{L}' = U^{-1}(\varphi,\theta,0)\boldsymbol{L}U(\varphi,\theta,0)$$

である．ここで第2章の問14の公式(5.43)と交換関係(1.2)を用いると，まず，

$$\begin{aligned}&\mathrm{e}^{-i\theta L_y/\hbar}L_x\mathrm{e}^{i\theta L_y/\hbar}\\ &= L_x + \left(\frac{-i\theta}{\hbar}\right)[L_y, L_x] + \frac{1}{2!}\left(\frac{-i\theta}{\hbar}\right)^2[L_y,[L_y,L_x]] + \frac{1}{3!}\left(\frac{-i\theta}{\hbar}\right)^3[L_y,[L_y,[L_y,L_x]]] + \cdots\\ &= L_x\left(1-\frac{1}{2!}\theta^2+\cdots\right) - L_z\left(\theta - \frac{1}{3!}\theta^3+\cdots\right) = L_x\cos\theta - L_z\sin\theta. \qquad (2)\end{aligned}$$

したがって，

$$\begin{aligned}L_{x'} &= \mathrm{e}^{-i\varphi L_z/\hbar}\mathrm{e}^{-i\theta L_y/\hbar}L_x\mathrm{e}^{i\theta L_y/\hbar}\mathrm{e}^{i\varphi L_z/\hbar}\\ &= \mathrm{e}^{-i\varphi L_z/\hbar}(L_x\cos\theta - L_z\sin\theta)\mathrm{e}^{i\varphi L_z/\hbar} \qquad (3)\end{aligned}$$

(2)と同じようにして計算すると

$$\mathrm{e}^{-i\varphi L_z/\hbar}L_x\mathrm{e}^{i\varphi L_z/\hbar} = L_x\left(1-\frac{1}{2!}\varphi^2+\cdots\right) + L_y\left(\varphi - \frac{1}{3!}\varphi^3+\cdots\right) = L_x\cos\varphi + L_y\sin\varphi.$$

これを(3)に代入すると

$$L_{x'} = L_x\cos\theta\cos\varphi + L_y\cos\theta\sin\varphi - L_z\sin\theta$$

となる．この変換性は(1)の第1式と同じ形である．同様にして

$$\begin{aligned}L_{y'} &= U^{-1}(\varphi,\theta,0)L_yU(\varphi,\theta,0) = L_y\left(1-\frac{1}{2!}\varphi^2+\cdots\right) - L_x\left(\varphi - \frac{1}{3!}\varphi^3+\cdots\right)\\ &= L_y\cos\varphi - L_x\sin\varphi,\\ L_{z'} &= U^{-1}(\varphi,\theta,0)L_zU(\varphi,\theta,0)\\ &= L_x\sin\theta\cos\varphi + L_y\sin\theta\sin\varphi + L_z\cos\theta\end{aligned}$$

である．すなわち，$\boldsymbol{L}$ は位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ と同じ変換性を示すベクトル演算子である．

問32　x 軸のまわりの角 θ の回転に対して，位置ベクトルは

$$x' = x, \qquad y' = y\cos\theta + z\sin\theta, \qquad z' = -y\sin\theta + z\cos\theta$$

と変換する．(2.55)より $U_x = \mathrm{e}^{i\theta\sigma_x/2}$ である．これより

$$\sigma_{x'} = U_x^{-1}\sigma_xU_x = \sigma_x,$$

$$\sigma_{y'} = U_x^{-1}\sigma_y U_x = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -i\sin(\theta/2) \\ -i\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & i\sin(\theta/2) \\ i\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 2\sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2} & -i\left(\cos^2\dfrac{\theta}{2}-\sin^2\dfrac{\theta}{2}\right) \\ i\left(\cos^2\dfrac{\theta}{2}-\sin^2\dfrac{\theta}{2}\right) & -2\sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sin\theta & -i\cos\theta \\ i\cos\theta & -\sin\theta \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\sin\theta + \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\cos\theta = \sigma_y\cos\theta + \sigma_z\sin\theta.$$

同様にして

$$\sigma_{z'} = U_x^{-1}\sigma_z U_x = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & -i\sin(\theta/2) \\ -i\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos(\theta/2) & i\sin(\theta/2) \\ i\sin(\theta/2) & \cos(\theta/2) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\theta & i\sin\theta \\ -i\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\cos\theta - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}\sin\theta = -\sigma_y\sin\theta + \sigma_z\cos\theta$$

となり，$(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ は (x, y, z) と同じくベクトルとしての変換性を示す．y 軸と z 軸のまわりの回転に対しても全く同様である．

問 33　(2.57)で $\alpha=\varphi$, $\beta=\theta$, $\gamma=0$ とおくと，

$$U(\varphi,\theta,0) = \begin{pmatrix} \cos\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \sin\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2} \\ -\sin\dfrac{\theta}{2}e^{i\varphi/2} & \cos\dfrac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2} \end{pmatrix}$$

である．図 3.1 の動径ベクトル $\boldsymbol{r}$ の方向を z' 軸にとると，z' 方向のスピン演算子 $\sigma_{z'}$ は上の $U=U(\varphi,\theta,0)$ の行列表示を用いることにより

$$\sigma_{z'} = U^{-1}\sigma_z U = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \sin\theta\, e^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}$$

$$= \sin\theta\cos\varphi\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin\theta\sin\varphi\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos\theta\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$= \sigma_x\sin\theta\cos\varphi + \sigma_y\sin\theta\sin\varphi + \sigma_z\cos\theta$$

で与えられる．これは $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ がベクトル演算子として変換することを考えれば当然である．さて，スピンが z' の正方向を向いている状態を，z 軸の上向きと下向きの状態 α と β の重ね合わせとして

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = a\alpha + b\beta$$

で表わすと，$\sigma_{z'}$ の固有値問題は，$\sigma_{z'}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = +1\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ より

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta\,\mathrm{e}^{-i\varphi} \\ \sin\theta\,\mathrm{e}^{i\varphi} & -\cos\theta \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = +1\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

で与えられる．すなわち

$$a\cos\theta + b\sin\theta\,\mathrm{e}^{-i\varphi} = a, \qquad a\sin\theta\,\mathrm{e}^{i\varphi} - b\cos\theta = b$$

これより

$$\frac{a}{b} = \frac{\sin\theta\,\mathrm{e}^{-i\varphi}}{1-\cos\theta} = \frac{2\sin\dfrac{\theta}{2}\cos\dfrac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\varphi}}{2\sin^2\dfrac{\theta}{2}} = \frac{\cos\dfrac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-i\varphi/2}}{\sin\dfrac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{i\varphi/2}}.$$

ここで $|a|^2+|b|^2=1$ を考慮すると，$a=\cos\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{-i\varphi/2}$, $b=\sin\dfrac{\theta}{2}\mathrm{e}^{i\varphi/2}$．したがって，$z$ 軸の正の方向にスピンを発見する確率と負の方向に発見する確率は，それぞれ $|a|^2=\cos^2(\theta/2)$, $|b|^2=\sin^2(\theta/2)$ で与えられる．したがって $\theta=\pi/2$ のとき，$|a|^2=|b|^2=1/2$ である．

問 34　磁場内の電子のハミルトニアンは，$H=-\dfrac{\hbar^2}{2m}\triangle-\dfrac{e}{m}\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B}$ で与えられる．第 1 項は電子の位置座標，第 2 項はスピン演算子だけを含んでいる．したがって状態関数は位置座標の関数とスピン状態の積に分離されるから，スピン状態だけを考えればよい．$\beta=e/m$ とおくと

$$\begin{aligned} -\beta\boldsymbol{s}\cdot\boldsymbol{B} &= -(\hbar\beta/2)(\sigma_x B_x+\sigma_y B_y+\sigma_z B_z) \\ &= -\frac{\hbar\beta}{2}\left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}B_0\cos\omega_0 t-\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}B_0\sin\omega_0 t+\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}B\right] \\ &= -\frac{\hbar\beta}{2}\begin{pmatrix} B & B_0\mathrm{e}^{i\omega_0 t} \\ B_0\mathrm{e}^{-i\omega_0 t} & -B \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

電子のスピン状態を

$$\begin{pmatrix} \chi^{(+)}(t) \\ \chi^{(-)}(t) \end{pmatrix} = \chi^{(+)}(t)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}+\chi^{(-)}(t)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

と表わすと，Schrödinger 方程式は

$$i\frac{\mathrm{d}\chi^{(+)}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\beta}{2}B\chi^{(+)}-\frac{\beta}{2}B_0\mathrm{e}^{i\omega_0 t}\chi^{(-)}, \qquad i\frac{\mathrm{d}\chi^{(-)}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\beta}{2}B_0\mathrm{e}^{-i\omega_0 t}\chi^{(+)}+\frac{\beta}{2}B\chi^{(-)} \tag{1}$$

で与えられる．ここで，$\chi^{(+)}(t)=a\,\mathrm{e}^{i\omega_0 t/2}\cdot\mathrm{e}^{i\Omega t/2}$, $\chi^{(-)}(t)=b\,\mathrm{e}^{-i\omega_0 t/2}\cdot\mathrm{e}^{i\Omega t/2}$ とおくと，(1)は

$$-\frac{\Omega}{2}a = \frac{1}{2}(\omega_0-\beta B)a-\frac{\beta}{2}B_0 b, \qquad -\frac{\Omega}{2}b = -\frac{1}{2}(\omega_0-\beta B)b-\frac{\beta}{2}B_0 a \tag{2}$$

となる．これが $a=b=0$ 以外の解をもつためには

$$\begin{vmatrix} \{\Omega+(\omega_0-\beta B)\} & -\beta B_0 \\ -\beta B_0 & \{\Omega-(\omega_0-\beta B)\} \end{vmatrix} = 0.$$

そこで $\omega\equiv\sqrt{(\omega_0-\beta B)^2+(\beta B_0)^2}$ とおくと，$\Omega=\pm\omega$ である．これを(2)に代入すると，$\Omega=+\omega$ のとき $b=a[(\omega_0-\beta B)+\omega]/\beta B_0$，$\Omega=-\omega$ のとき $b=a[(\omega_0-\beta B)-\omega]/\beta B_0$ である．したがって(1)の一般解は

$$\begin{aligned} \chi^{(+)}(t) &= e^{i\omega_0 t/2}[a_1 e^{i\omega t/2}+a_2 e^{-i\omega t/2}], \\ \chi^{(-)}(t) &= e^{-i\omega_0 t/2}\left[\frac{(\omega_0-\beta B)+\omega}{\beta B_0}a_1 e^{i\omega t/2}+\frac{(\omega_0-\beta B)-\omega}{\beta B_0}a_2 e^{-i\omega t/2}\right] \end{aligned} \tag{3}$$

で与えられる．初期条件 $\chi^{(+)}(0)=1$, $\chi^{(-)}(0)=0$ より，

$$a_1 = [\omega-(\omega_0-\beta B)]/2\omega, \qquad a_2 = [\omega+(\omega_0-\beta B)]/2\omega$$

である．これを(3)に代入すると

$$\begin{aligned} \chi^{(+)}(t) &= \frac{e^{i\omega_0 t/2}}{2\omega}\{[\omega-(\omega_0-\beta B)]e^{i\omega t/2}+[\omega+(\omega_0-\beta B)]e^{-i\omega t/2}\}, \\ \chi^{(-)}(t) &= e^{-i\omega_0 t/2}\, i\beta B_0 \sin(\omega t/2)/\sqrt{(\omega_0-\beta B)^2+(\beta B_0)^2} \end{aligned}$$

をえる．したがって，時刻 t にスピンを z 軸の下向きに発見する確率は

$$|\chi^{(-)}(t)|^2 = \frac{(\beta B_0)^2}{(\omega_0-\beta B)^2+(\beta B_0)^2}\sin^2\{\sqrt{(\omega_0-\beta B)^2+(\beta B_0)^2}\cdot t/2\}.$$

$\omega_0=\beta B$ のときを磁気共鳴といい，このとき

$$|\chi^{(-)}(t)|^2 = \sin^2(\beta B_0 t/2).$$

問 35　$\boldsymbol{J}'=U^{-1}(\varphi,\theta,0)\boldsymbol{J}U(\varphi,\theta,0)$ において

$$U(\varphi,\theta,0) \doteq \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\cos\theta)e^{i\varphi} & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1}{2}(1-\cos\theta)e^{-i\varphi} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\, e^{i\varphi} & \cos\theta & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\, e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{2}(1-\cos\theta)e^{i\varphi} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \frac{1}{2}(1+\cos\theta)e^{-i\varphi} \end{pmatrix},$$

$$U^{-1}(\varphi,\theta,0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(1+\cos\theta)e^{-i\varphi} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\, e^{-i\varphi} & \frac{1}{2}(1-\cos\theta)e^{-i\varphi} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta & \cos\theta & -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \\ \frac{1}{2}(1-\cos\theta)e^{i\varphi} & \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\, e^{i\varphi} & \frac{1}{2}(1+\cos\theta)e^{i\varphi} \end{pmatrix}$$

である．なお

$$J_x=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix},\qquad J_y=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix},\qquad J_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}.$$

これらを用いると

$$J_{x'}=U^{-1}(\varphi,\theta,0)J_xU(\varphi,\theta,0)=\begin{pmatrix}-\sin\theta & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\theta\,\mathrm{e}^{-i\varphi} & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\theta\,\mathrm{e}^{i\varphi} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\theta\,\mathrm{e}^{-i\varphi}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\cos\theta\,\mathrm{e}^{i\varphi} & \sin\theta\end{pmatrix}$$

$$=\cos\theta\cos\varphi\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&1\\0&1&0\end{pmatrix}+\cos\theta\sin\varphi\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}0&-i&0\\i&0&-i\\0&i&0\end{pmatrix}-\sin\theta\begin{pmatrix}1&0&0\\0&0&0\\0&0&-1\end{pmatrix}$$

$$=\cos\theta\cos\varphi\,J_x+\cos\theta\sin\varphi\,J_y-\sin\theta\,J_z.$$

同様にして

$$J_{y'}=U^{-1}(\varphi,\theta,0)J_yU(\varphi,\theta,0)=\cos\varphi\,J_y-\sin\varphi\,J_x,$$

$$J_{z'}=U^{-1}(\varphi,\theta,0)J_zU(\varphi,\theta,0)=\sin\theta\cos\varphi\,J_x+\sin\theta\sin\varphi\,J_y+\cos\theta\,J_z.$$

これらの変換性より，$\boldsymbol{J}$ がベクトル演算子であることが確かめられた．

問 36　$\hat{J}^{(\pm)}|m\rangle$ は $m=j,\ j-1$ のとき，それぞれ

$$\hat{J}^{(+)}|j\rangle=0,\qquad \hat{J}^{(+)}|j-1\rangle=\sqrt{2j}\,|j\rangle,\qquad \hat{J}^{(-)}|j\rangle=\sqrt{2j}\,|j-1\rangle$$

である．$\hat{\boldsymbol{J}}^2=(\hat{\boldsymbol{J}}_1{}^2+\hat{\boldsymbol{J}}_2{}^2+2\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z})+(\hat{J}_1^{(-)}\hat{J}_2^{(+)}+\hat{J}_1^{(+)}\hat{J}_2^{(-)})$ を用いると

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j_1-1,j_2\rangle=\{j_1(j_1+1)+j_2(j_2+1)+2(j_1-1)j_2\}\,|j_1-1,j_2\rangle+2\sqrt{j_1j_2}\,|j_1,j_2-1\rangle,$$

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j_1,j_2-1\rangle=\{j_1(j_1+1)+j_2(j_2+1)+2j_1(j_2-1)\}\,|j_1,j_2-1\rangle+2\sqrt{j_1j_2}\,|j_1-1,j_2\rangle.$$

これより

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle\!\rangle=-\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\hat{\boldsymbol{J}}^2|j_1-1,j_2\rangle+\sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\hat{\boldsymbol{J}}^2|j_1,j_2-1\rangle$$

$$=-\sqrt{j_2/(j_1+j_2)}\,[j_1(j_1+1)+j_2(j_2+1)+2(j_1-1)j_2-2j_1]\,|j_1-1,j_2\rangle$$

$$+\sqrt{j_1/(j_1+j_2)}\,[j_1(j_1+1)+j_2(j_2+1)+2j_1(j_2-1)-2j_2]\,|j_1,j_2-1\rangle$$

$$=[j_1(j_1+1)+j_2(j_2+1)+2j_1j_2-2(j_1+j_2)]\,|j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle\!\rangle$$

$$=(j_1+j_2-1)\{(j_1+j_2-1)+1\}\,|j_1+j_2-1,j_1+j_2-1\rangle\!\rangle.$$

すなわち，$|j_1+j_2-1,\ j_1+j_2-1\rangle\!\rangle$ は $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ の量子数 $j=(j_1+j_2-1)$ に属する固有ベクトルである．

問 37　$\hat{\boldsymbol{s}}/\hbar \to \hat{\boldsymbol{s}}$ と書くと，$\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{M}} + \hat{\boldsymbol{s}}$.

$l=1,\ m_l=1,\ 0,\ -1$　　それらの状態を $|1\rangle,\ |0\rangle,\ |-1\rangle$,

$s=1/2,\ m_s=1/2, -1/2$　それらの状態を $|+\rangle,\ |-\rangle$

と書くことにする．このとき(3.10)の表は

m_s \ m_l	1	0	−1
1/2	3/2	1/2	−1/2
−1/2	1/2	−1/2	−3/2

すると(3.11)は

$$m = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2 \longrightarrow j = 3/2,$$
$$m = 1/2, -1/2 \longrightarrow j = 1/2.$$

そこでまず，$j=3/2,\ m=3/2$ の状態は

$$|3/2, 3/2\rangle\!\rangle = |1, +\rangle. \tag{1}$$

次に，これに $\hat{J}^{(-)} = \hat{M}^{(-)} + \hat{s}^{(-)}$ を掛けると

$$\hat{J}^{(-)}|3/2, 3/2\rangle\!\rangle = \sqrt{3}\,|3/2, 1/2\rangle\!\rangle, \quad (\hat{M}^{(-)} + \hat{s}^{(-)})|1, +\rangle = \sqrt{2}\,|0, +\rangle + |1, -\rangle.$$

これより

$$|3/2, 1/2\rangle\!\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|0, +\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|1, -\rangle. \tag{2}$$

また

$$\hat{J}^{(-)}|3/2, 1/2\rangle\!\rangle = 2|3/2, -1/2\rangle\!\rangle,$$
$$(\hat{M}^{(-)} + \hat{s}^{(-)})\left\{\sqrt{\frac{2}{3}}|0, +\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|1, -\rangle\right\} = \frac{2}{\sqrt{3}}\{|-1, +\rangle + \sqrt{2}\,|0, -\rangle\}$$

より

$$|3/2, -1/2\rangle\!\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|-1, +\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|0, -\rangle. \tag{3}$$

最後に

$$\hat{J}^{(-)}|3/2, -1/2\rangle\!\rangle = \sqrt{3}\,|3/2, -3/2\rangle\!\rangle,$$
$$(\hat{M}^{(-)} + \hat{s}^{(-)})\left\{\sqrt{\frac{1}{3}}|-1, +\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|0, -\rangle\right\} = \sqrt{3}\,|-1, -\rangle$$

より

$$|3/2, -3/2\rangle\!\rangle = |-1, -\rangle. \tag{4}$$

次に状態 $|1/2,\ 1/2\rangle\!\rangle$ は(2)に直交するように決める．そこで

$$|1/2, 1/2\rangle\!\rangle = A\,|0, +\rangle + B\,|1, -\rangle$$

とおくと，$\langle\!\langle 3/2,\ 1/2 | 1/2,\ 1/2 \rangle\!\rangle = \sqrt{\dfrac{3}{2}}A + \sqrt{\dfrac{1}{2}}B = 0$．また規格化条件 $|A|^2 + |B|^2 = 1$ より $A = 1/\sqrt{3}$，$B = -\sqrt{2/3}$．したがって

$$|1/2, 1/2\rangle\!\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|0, +\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1, -\rangle. \tag{5}$$

また

$$\hat{J}^{(-)}|1/2, 1/2\rangle\!\rangle = |1/2, -1/2\rangle\!\rangle,$$

$$(\hat{M}^{(-)} + \hat{s}^{(-)})\left\{\sqrt{\frac{1}{3}}|0, +\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1, -\rangle\right\} = \sqrt{\frac{2}{3}}|-1, +\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|0, -\rangle$$

より

$$|1/2, -1/2\rangle\!\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|-1, +\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|0, -\rangle. \tag{6}$$

問 38　(3.10)の表をつくると

m_2 \ m_1	j	$j-1$	………	$m+1$	m	………	$-j$
1/2	$j+1/2$	$j-1/2$	………	$m+3/2$	$m+1/2$	………	$-j+1/2$
−1/2	$j-1/2$	$j-3/2$	………	$m+1/2$	$m-1/2$	………	$-j-1/2$

(3.11)は

$$m = j+1/2, j-1/2, \cdots, m+1/2, \cdots, -j-1/2. \longrightarrow j+1/2,$$
$$m = j-1/2, \cdots, m+1/2, m-1/2, \cdots, -j+1/2. \longrightarrow j-1/2.$$

合成系の $m = m_1 + m_2$ が $m+1/2$ の状態は，線形結合

$$|j+1/2, m+1/2\rangle\!\rangle = a|m, 1/2\rangle + b|m+1, -1/2\rangle$$

で表わされる．未定係数 a と b を $\hat{\boldsymbol{J}}^2$ を計算して決める．まず

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j+1/2, m+1/2\rangle\!\rangle = (j+1/2)(j+3/2)|j+1/2, m+1/2\rangle\!\rangle$$
$$= (j+1/2)(j+3/2)\{a|m, 1/2\rangle + b|m+1, -1/2\rangle\}. \tag{1}$$

一方，$\hat{\boldsymbol{J}}^2 = (\hat{\boldsymbol{J}}_1{}^2 + \hat{\boldsymbol{J}}_2{}^2 + 2\hat{J}_{1z}\hat{J}_{2z}) + \hat{J}_1{}^{(+)}\hat{J}_2{}^{(-)} + \hat{J}_1{}^{(-)}\hat{J}_2{}^{(+)}$ を用いると

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|m, 1/2\rangle = [j(j+1) + 1/2(1/2+1) + 2m\cdot 1/2]|m, 1/2\rangle$$
$$+ \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|m+1, -1/2\rangle,$$

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|m+1, -1/2\rangle = [j(j+1) + 1/2(1/2+1) + 2(m+1)(-1/2)]|m+1, -1/2\rangle$$
$$+ \sqrt{(j+m+1)(j-m)}|m, 1/2\rangle.$$

ここで第1式で $\hat{J}_2{}^{(+)}|1/2\rangle = 0$，第2式で $\hat{J}_2{}^{(-)}|-1/2\rangle = 0$ を用いている．これらから

$$\hat{\boldsymbol{J}}^2|j+1/2, m+1/2\rangle\!\rangle = [a\{j(j+1) + 3/4 + m\} + b\sqrt{(j-m)(j+m+1)}]|m, 1/2\rangle$$
$$+ [b\{j(j+1) + 3/4 - (m+1)\} + a\sqrt{(j-m)(j+m+1)}]|m+1, -1/2\rangle. \tag{2}$$

(1)と(2)に左から $\langle m,1/2|$ を掛けて右辺を比較すると

$$a(j+1/2)(j+3/2)=a\{j(j+1)+3/4+m\}+b\sqrt{(j-m)(j+m+1)}.$$

これより $a(j-m)=b\sqrt{(j-m)(j+m+1)}$ をえる．これと $|a|^2+|b|^2=1$ より

$$a=\sqrt{\frac{j+m+1}{2j+1}},\qquad b=\sqrt{\frac{j-m}{2j+1}}.$$

このとき位相は，$m=j$ のとき $|j+1/2,\ j+1/2\rangle\!\rangle=+|j,\ 1/2\rangle$ となるように決めている．こうして

$$|j+1/2,m+1/2\rangle\!\rangle=\sqrt{\frac{j+m+1}{2j+1}}|m,1/2\rangle+\sqrt{\frac{j-m}{2j+1}}|m+1,\ -1/2\rangle$$

をえる．また，直交性の条件を利用することにより

$$|j-1/2,m+1/2\rangle\!\rangle=\sqrt{\frac{j-m}{2j+1}}|m,1/2\rangle-\sqrt{\frac{j+m+1}{2j+1}}|m+1,\ -1/2\rangle.$$

ここで $m=j,\ j-1,\ \cdots,\ -j$ である．

問 39　ハミルトニアンは，$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}^2+\frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2-e\hat{x}\mathcal{E}$．そこで，$\hat{x}'=\hat{x}-e\mathcal{E}/m\omega_0^2$，$\hat{p}'=\hat{p}$ と変換すると

$$\hat{H}=\frac{1}{2m}\hat{p}'^2+\frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}'^2-\frac{e^2\mathcal{E}^2}{2m\omega_0^2}$$

となる．このとき，$[\hat{x}',\hat{p}']=[\hat{x},\hat{p}]=i\hbar$ であるから，上の変換は正準変換である．さて

$$\left(\frac{1}{2m}\hat{p}'^2+\frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}'^2\right)|n\rangle=(n+1/2)\hbar\omega_0|n\rangle$$

であるから，

$$\hat{H}|n\rangle=E|n\rangle=[(n+1/2)\hbar\omega_0-e^2\mathcal{E}^2/2m\omega_0^2]|n\rangle.$$

これより，厳密解は

$$E=(n+1/2)\hbar\omega_0-e^2\mathcal{E}^2/2m\omega_0^2. \tag{1}$$

次に摂動計算をする．$\hat{x}=\sqrt{\hbar/2m\omega_0}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)$，$\hat{p}=-i\sqrt{m\hbar\omega_0/2}(\hat{a}-\hat{a}^\dagger)$ とおくと，$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}$ において

$$\hat{H}_0=\hbar\omega_0(\hat{a}^\dagger\hat{a}+1/2),\qquad \hat{V}=-e\hat{x}\mathcal{E}=-e\sqrt{\hbar/2m\omega_0}\mathcal{E}(\hat{a}+\hat{a}^\dagger).$$

ここで $\hat{H}_0|n\rangle=E_n^{(0)}|n\rangle$，$E_n^{(0)}=(n+1/2)\hbar\omega_0$ とすると，第 1 近似は

$$E_n^{(1)}=\langle n|\hat{V}|n\rangle=-e\sqrt{\hbar/2m\omega_0}\mathcal{E}\langle n|(\hat{a}+\hat{a}^\dagger)|n\rangle=0.$$

第 2 近似は

$$E_n^{(2)}=\sum_{m\neq n}\frac{\langle n|\hat{V}|m\rangle\langle m|\hat{V}|n\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}.$$

ここで $\hat{a}^\dagger|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle$，$\hat{a}|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle$ を用いると

$$\langle m|\hat{V}|n\rangle = -e\sqrt{\hbar/2m\omega_0}\cdot\mathcal{E}\{\sqrt{n}\,\delta_{m,n-1}+\sqrt{n+1}\,\delta_{m,n+1}\}.$$

これを用いると

$$E_n^{(2)} = \frac{\langle n|\hat{V}|n-1\rangle\langle n-1|\hat{V}|n\rangle}{E_n^{(0)}-E_{n-1}^{(0)}}+\frac{\langle n|\hat{V}|n+1\rangle\langle n+1|\hat{V}|n\rangle}{E_n^{(0)}-E_{n+1}^{(0)}}$$

において，$E_n^{(0)}-E_{n-1}^{(0)}=\hbar\omega_0$，$E_n^{(0)}-E_{n+1}^{(0)}=-\hbar\omega_0$ より，

$$E_n^{(2)} = \left(\frac{\hbar}{2m\omega_0}\right)e^2\mathcal{E}^2\{n-(n+1)\}/\hbar\omega_0 = -(e^2/2m\omega_0^2)\mathcal{E}^2.$$

これより

$$E = E_n^{(0)}+E_n^{(2)} = (n+1/2)\hbar\omega_0-(e^2/2m\omega_0^2)\mathcal{E}^2.$$

これは(1)の厳密解と一致する．

問 40　$\hat{H}$ の厳密な固有値を E とすると，それは

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_a-E & 0 & a \\ 0 & \varepsilon_a-E & b \\ a^* & b^* & \varepsilon_b-E \end{vmatrix} = 0$$

の解で与えられる．これより $(\varepsilon_a-E)[(\varepsilon_a-E)(\varepsilon_b-E)-(|a|^2+|b|^2)]=0$．この解は

$$E = \varepsilon_a, \qquad E = \frac{1}{2}\left[(\varepsilon_a+\varepsilon_b)\pm(\varepsilon_b-\varepsilon_a)\sqrt{1+\frac{4(|a|^2+|b|^2)}{(\varepsilon_b-\varepsilon_a)^2}}\right]$$

である．ここで，$(\varepsilon_b-\varepsilon_a)\gg\sqrt{|a|^2+|b|^2}$ とすると

$$E_1 \cong \varepsilon_a-\frac{|a|^2+|b|^2}{\varepsilon_b-\varepsilon_a}, \qquad E_2 = \varepsilon_a, \qquad E_3 \cong \varepsilon_b+\frac{|a|^2+|b|^2}{\varepsilon_b-\varepsilon_a}. \tag{1}$$

次に摂動計算でこれを求める．

$$\begin{pmatrix} E_1^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \varepsilon_a & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_a & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_b \end{pmatrix}, \qquad \begin{pmatrix} \langle 1|\hat{V}|1\rangle & \langle 1|\hat{V}|2\rangle & \langle 1|\hat{V}|3\rangle \\ \langle 2|\hat{V}|1\rangle & \langle 2|\hat{V}|2\rangle & \langle 2|\hat{V}|3\rangle \\ \langle 3|\hat{V}|1\rangle & \langle 3|\hat{V}|2\rangle & \langle 3|\hat{V}|3\rangle \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 & a \\ 0 & 0 & b \\ a^* & b^* & 0 \end{pmatrix}$$

と書くと，第 1 近似は

$$E_1^{(1)} = \langle 1|\hat{V}|1\rangle = 0, \qquad E_2^{(1)} = \langle 2|\hat{V}|2\rangle = 0, \qquad E_3^{(1)} = \langle 3|\hat{V}|3\rangle = 0.$$

第 2 近似を求めるに当って，縮退のないときの公式を適用すると

$$E_1^{(2)} = \frac{\langle 1|\hat{V}|3\rangle\langle 3|\hat{V}|1\rangle}{E_1^{(0)}-E_3^{(0)}} = -\frac{|a|^2}{\varepsilon_b-\varepsilon_a}, \qquad E_2^{(2)} = \frac{\langle 2|\hat{V}|3\rangle\langle 3|\hat{V}|2\rangle}{E_2^{(0)}-E_3^{(0)}} = -\frac{|b|^2}{\varepsilon_b-\varepsilon_a}$$

となり，これは(1)に一致せず誤った結果をえる．これに対して，$E_3^{(0)}$ は縮退がないので

$$E_3^{(2)} = \sum_n \frac{\langle 3|\hat{V}|n\rangle\langle n|\hat{V}|3\rangle}{E_3^{(0)}-E_n^{(0)}} = \frac{\langle 3|\hat{V}|1\rangle\langle 1|\hat{V}|3\rangle}{\varepsilon_b-\varepsilon_a}+\frac{\langle 3|\hat{V}|2\rangle\langle 2|\hat{V}|3\rangle}{\varepsilon_b-\varepsilon_a} = \frac{|a|^2+|b|^2}{\varepsilon_b-\varepsilon_a}$$

となり，正しい結果がえられる．$E_1^{(2)}$, $E_2^{(2)}$ を求めるには，(1.56)の公式を適用する必要がある．いまの場合，$|1\rangle\!\rangle=|1\rangle$，$|2\rangle\!\rangle=|2\rangle$ なので，(1.56) は

$$\begin{vmatrix} \langle 1|\hat{V}^{(2)}|1\rangle - E^{(2)} & \langle 1|\hat{V}^{(2)}|2\rangle \\ \langle 2|\hat{V}^{(2)}|1\rangle & \langle 2|\hat{V}^{(2)}|2\rangle - E^{(2)} \end{vmatrix} = 0$$

のように表わされる．ここで

$$\langle 1|\hat{V}^{(2)}|1\rangle = \frac{\langle 1|\hat{V}|3\rangle\langle 3|\hat{V}|1\rangle}{\varepsilon_a-\varepsilon_b} = \frac{|a|^2}{\varepsilon_a-\varepsilon_b}, \qquad \langle 1|\hat{V}^{(2)}|2\rangle = \frac{\langle 1|\hat{V}|3\rangle\langle 3|\hat{V}|2\rangle}{\varepsilon_a-\varepsilon_b} = \frac{ab^*}{\varepsilon_a-\varepsilon_b},$$

$$\langle 2|\hat{V}^{(2)}|1\rangle = \frac{\langle 2|\hat{V}|3\rangle\langle 3|\hat{V}|1\rangle}{\varepsilon_a-\varepsilon_b} = \frac{ba^*}{\varepsilon_a-\varepsilon_b}, \qquad \langle 2|\hat{V}^{(2)}|2\rangle = \frac{\langle 2|\hat{V}|3\rangle\langle 3|\hat{V}|2\rangle}{\varepsilon_a-\varepsilon_b} = \frac{|b|^2}{\varepsilon_a-\varepsilon_b}.$$

これを上に代入すると

$$\begin{vmatrix} \dfrac{|a|^2}{\varepsilon_a-\varepsilon_b} - E^{(2)} & \dfrac{ab^*}{\varepsilon_a-\varepsilon_b} \\ \dfrac{a^*b}{\varepsilon_a-\varepsilon_b} & \dfrac{|b|^2}{\varepsilon_a-\varepsilon_b} - E^{(2)} \end{vmatrix} = 0.$$

これより，$E^{(2)}\{E^{(2)}-(|a|^2+|b|^2)/(\varepsilon_a-\varepsilon_b)\}=0$. すなわち

$$E_1^{(2)} = -(|a|^2+|b|^2)/(\varepsilon_b-\varepsilon_a), \qquad E_2^{(2)} = 0.$$

よって

$$E_1 = E_1^{(0)}+E_1^{(2)} = \varepsilon_a - \frac{|a|^2+|b|^2}{\varepsilon_b-\varepsilon_a}, \qquad E_2 = E_2^{(0)}+E_2^{(0)} = \varepsilon_a$$

で，これらは(1)の結果と一致する．

問 41　水素原子の固有関数

$$\psi_{1,0,0} = (4\pi a_0^3)^{-1/2} 2 e^{-r/a_0}, \qquad \psi_{2,0,0} = (4\pi a_0^3)^{-1/2}(1/\sqrt{2})(1-r/2a_0)e^{-r/2a_0}$$

を用いると，積分は

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}} \psi_{2,0,0}{}^*(\boldsymbol{r})\psi_{1,0,0}(\boldsymbol{r}) d^3r$$
$$= \frac{1}{4\pi} a_0^{-3/2}\cdot(2a_0)^{-3/2}\cdot 2\int_0^{\infty} r^2 dr\, e^{-r/a_0}(2-r/a_0)e^{-r/2a_0}\int_0^{\pi} e^{iKr\cos\theta}\sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi$$
$$= \frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{1}{a_0}\right)^3 \frac{1}{iK}\int_0^{\infty} e^{-3r/2a_0}(e^{iKr}-e^{-iKr})(2r-r^2/a_0)dr.$$

ここで

$$\int_0^{\infty} e^{-3r/2a_0}(e^{iKr}-e^{-iKr})2r\,dr = \frac{8i(3/2a_0)K}{[K^2+(3/2a_0)^2]^2},$$
$$\int_0^{\infty} e^{-3r/2a_0}(e^{iKr}-e^{-iKr})(r^2/a_0)dr = \frac{1}{a_0}\cdot\frac{4iK\{3(3/2a_0)^2-K^2\}}{[K^2+(3/2a_0)^2]^3}$$

である．なおこれらの積分で積分公式

$$\int_0^\infty x^n \mathrm{e}^{-ax}\mathrm{d}x = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

を用いている．これらの結果を加えると(2.41)をえる．これより

$$\langle \boldsymbol{k}';2,0,0|\hat{V}|\boldsymbol{k};1,0,0\rangle = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{16\sqrt{2}\,\pi a_0{}^2}{[(Ka_0)^2+9/4]^3}.$$

したがって，微分断面積は

$$\sigma(\theta) = \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2}\right)^2\cdot\frac{k'}{k}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2\cdot\frac{16^2\cdot 2\pi^2 a_0{}^4}{[(Ka_0)^2+9/4]^6} = \frac{k'}{k}\cdot\frac{128\,a_0{}^2}{[(Ka_0)^2+9/4]^6}.$$

ここで Bohr 半径 $a_0=4\pi\varepsilon_0\hbar^2/me^2$ を用いている．

全断面積は，$K^2=k^2+k'^2-2kk'\cos\theta$ より，$K\mathrm{d}K=kk'\sin\theta\mathrm{d}\theta$ であるから

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = 128\,a_0{}^2\cdot\frac{k'}{k}\int_0^\pi\frac{\sin\theta\mathrm{d}\theta}{[(Ka_0)^2+9/4]^6}\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi = 2\pi\times 128\,a_0{}^2\frac{1}{k^2}\cdot\int_{(k-k')}^{(k+k')}\frac{K\mathrm{d}K}{[(Ka_0)^2+9/4]^6}$$
$$= \frac{128\times 2\pi}{10\,k^2}\left\{\frac{1}{[(k-k')^2a_0{}^2+9/4]^5}-\frac{1}{[(k+k')^2a_0{}^2+9/4]^5}\right\}.$$

$ka_0\gg 1$ のとき，右辺の第 2 項は無視でき，また $k'^2=k^2-\dfrac{2m}{\hbar^2}\cdot\dfrac{3e^2}{8\cdot 4\pi\varepsilon_0 a_0}$ より，第 1 項の分母で $(k-k')\cong 0$ とすることができるので

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = \frac{2\pi\cdot 128}{10\,k^2}\left(\frac{4}{9}\right)^5 = \frac{128\pi}{5k^2}\left(\frac{2}{3}\right)^{10}.$$

問 42　転移の確率振幅は $\langle n',l',m'|\hat{z}|n,l,m\rangle$ に比例する．水素原子の固有関数を用いて角積分を行うことによって，これを直接確かめることができるが，次の§4 の選択規則によって，上の行列要素が 0 でないのは，$l'=l\pm 1$，$m'=m$ のときだけである．したがって，$l'\neq l\pm 1$ の $\langle 2,0,0|\hat{z}|1,0,0\rangle=0$，$m'\neq m$ の $\langle 2,1,\pm 1|\hat{z}|1,0,0\rangle=0$．転移が可能なのは，$\langle 2,1,0|\hat{z}|1,0,0\rangle$ のときだけである．このときの確率振幅を $C_{2\mathrm{p},1\mathrm{s}}{}^{(1)}$ と書くと

$$C_{2\mathrm{p},1\mathrm{s}}{}^{(1)}(\infty) = +\frac{i}{\hbar}e\mathscr{E}_0\int_0^\infty \mathrm{e}^{-t'/\tau}\,\mathrm{e}^{i(E_{2\mathrm{p}}-E_{1\mathrm{s}})t'/\hbar}\,\mathrm{d}t\cdot\langle 2,1,0|\hat{z}|1,0,0\rangle.$$

ここで

$$\psi_{1,0,0} = \sqrt{\frac{1}{4\pi a_0{}^3}}\,2\mathrm{e}^{-r/a_0},\qquad \psi_{2,1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi a_0{}^3}}\frac{1}{2\sqrt{6}}\left(\frac{r}{a_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2a_0}\cos\theta$$

を用いると，

$$\langle 2,1,0|\hat{z}|1,0,0\rangle = \int_{-\infty}^\infty \psi_{2,1,0}{}^* z\,\psi_{1,0,0}\mathrm{d}^3 r = \frac{2^7\sqrt{2}}{3^5}a_0.$$

また，$E_{2p}-E_{1s}=(3/8)mc^2\alpha^2$ より

$$C_{2p,1s}{}^{(1)}(\infty) = \frac{i}{\hbar}e\mathcal{E}_0\cdot\frac{2^7\sqrt{2}}{3^5}a_0\int_0^\infty \mathrm{e}^{-t/\tau}\,\mathrm{e}^{i(3mc^2\alpha^2/8\hbar)t}\,\mathrm{d}t$$
$$= \frac{i}{\hbar}e\mathcal{E}_0\cdot\frac{2^7\sqrt{2}}{3^5}a_0\cdot\frac{8\hbar\tau}{8\hbar-i3mc^2\alpha^2\tau}.$$

したがって，十分に長い時間の後での転移確率は

$$|C_{2p,1s}{}^{(1)}(\infty)|^2 = e^2\mathcal{E}_0{}^2\left(\frac{2^{15}}{3^{10}}\right)a_0{}^2\cdot\frac{8^2\tau^2}{[(8\hbar)^2+3^2(mc^2\alpha^2)^2\tau^2]}.$$

問 43　q^{N} を中性子，q^{P} を陽子，q^{e} を電子の位置およびスピン座標とする．2 個の ^{4}He からなる系の状態関数は，

$$\psi(q_1{}^{\mathrm{N}},q_2{}^{\mathrm{N}},q_1{}^{\mathrm{P}},q_2{}^{\mathrm{P}},q_1{}^{\mathrm{e}},q_2{}^{\mathrm{e}}\,;\,q_1{}^{\mathrm{N}'},q_2{}^{\mathrm{N}'},q_1{}^{\mathrm{P}'},q_2{}^{\mathrm{P}'},q_1{}^{\mathrm{e}'},q_2{}^{\mathrm{e}'}), \tag{1}$$

^{3}He からなる系の状態関数は

$$\psi(q_1{}^{\mathrm{N}},q_1{}^{\mathrm{P}},q_2{}^{\mathrm{P}},q_1{}^{\mathrm{e}},q_2{}^{\mathrm{e}}\,;\,q_1{}^{\mathrm{N}'},q_1{}^{\mathrm{P}'},q_2{}^{\mathrm{P}'},q_1{}^{\mathrm{e}'},q_2{}^{\mathrm{e}'}) \tag{2}$$

である．中性子，陽子，電子のいずれも Fermi 粒子であるから，$q_1{}^{\mathrm{N}}\longleftrightarrow q_1{}^{\mathrm{N}'}$ などの 1 対の同種粒子のいれかえに対して状態関数は反対称で符号を変える．したがって，2 対の粒子のいれかえに対しては符号は変わらない．(1)の場合，^{4}He のいれかえは偶数対のいれかえとなるから符号を変えず，(2)の場合，^{3}He のいれかえは奇数対のいれかえとなり，符号を変える．よって，^{4}He は Bose 粒子，^{3}He は Fermi 粒子である．

問 44　スピンが上向きの 2 個の電子のスピン状態は，第 4 章(3.22)の $\alpha_1\alpha_2$ で表わされ，これは電子のいれかえに対して対称である．したがって，位置に関する状態関数が反対称でなくてはならない．すなわちこのとき，全状態関数は

$$\psi^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[\phi_a(\boldsymbol{r}_1)\phi_b(\boldsymbol{r}_2)-\phi_a(\boldsymbol{r}_2)\phi_b(\boldsymbol{r}_1)\Big]\alpha_1\alpha_2$$

で与えられる．ここで $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{r}_2$ とすれば，$\psi^{(\mathrm{A})}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})=0$.

問 45　この系のハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)+\frac{1}{2}m\omega_0{}^2(x^2+y^2)+gxy \tag{1}$$

で表わされる．ここで $\xi=(x+y)/\sqrt{2}$，$\eta=(x-y)/\sqrt{2}$ とおくと，$x^2+y^2=\xi^2+\eta^2$，そして $gxy=(g/2)(\xi^2-\eta^2)$ であるから，(1)を ξ,η で表わすと

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}\right)+\frac{1}{2}(m\omega_0{}^2+g)\xi^2+\frac{1}{2}(m\omega_0{}^2-g)\eta^2$$

$$= \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+\frac{1}{2}m\Omega^2\xi^2\right]+\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}+\frac{1}{2}m\omega^2\eta^2\right]. \tag{2}$$

ここで $m\Omega^2=m\omega_0{}^2+g>0$, $m\omega^2=m\omega_0{}^2-g>0$ とおいた．(2)のエネルギー固有値は

$$E = \hbar\Omega(N+1/2)+\hbar\omega(n+1/2), \qquad N, n = 0, 1, 2, \cdots,$$

固有関数は

$$\psi(x, y) = AH_N(\xi')\mathrm{e}^{-\xi'^2/2}\cdot H_n(\eta')\mathrm{e}^{-\eta'^2/2} \tag{3}$$

である．ここで A は規格化定数，$\xi'=\sqrt{2\Omega/\hbar}\cdot\xi$, $\eta'=\sqrt{2\omega/\hbar}\cdot\eta$ であり，H_n は Hermite の多項式である．

さて，2粒子のいれかえ $x\longleftrightarrow y$ に対して，$\xi\to\xi$, $\eta\to-\eta$ である．したがって，Bose 系の場合には，(3)の $H_n(\eta')$ は η' の対称関数でなければならない．第2章(9.37)の H_n の定義より，H_n は n が偶数のとき偶関数，奇数のとき奇関数である．よって，Bose 系のとき，n＝偶数のみが許される．一方，Fermi 系では，n＝奇数のみが許される．なお，第1項の量子数 N としてはどちらの値も許される．

問 46　(2.21)で $\lambda=2Z/a_0$ とおくと，必要な積分は

$$J = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\lambda(r_1+r_2)}\frac{1}{r_{12}}\mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2.$$

ここでベクトル $\boldsymbol{r}_1$ の極座標を $(r_1, \theta_1, \varphi_1)$ として，はじめその $\boldsymbol{r}_1$ を固定して，その $\boldsymbol{r}_1$ の方向を z 軸にとった $\boldsymbol{r}_2$ の極座標を (r_2, θ, φ) として $\boldsymbol{r}_2$ の角積分をさきに行い，そのあとで $\boldsymbol{r}_1$ に関する積分を行うとよい．また，$\boldsymbol{r}_1$ と $\boldsymbol{r}_2$ の間の角を θ としたのであるから，$r_{12}=\sqrt{r_1{}^2+r_2{}^2-2r_1r_2\cos\theta}$ である．すると

$$J = \int\mathrm{e}^{-\lambda(r_1+r_2)}r_1{}^2\mathrm{d}r_1\sin\theta_1\mathrm{d}\theta_1\mathrm{d}\varphi_1\cdot r_2{}^2\mathrm{d}r_2\times\int_0^{\pi}\frac{\sin\theta\,\mathrm{d}\theta}{\sqrt{r_1{}^2+r_2{}^2-2r_1r_2\cos\theta}}\times\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi$$

となる．ここで

$$\int_0^{\pi}\frac{\sin\theta\,\mathrm{d}\theta}{\sqrt{r_1{}^2+r_2{}^2-2r_1r_2\cos\theta}} = \frac{1}{r_1r_2}(r_1+r_2-|r_1-r_2|) = \begin{cases} 2/r_1, & r_1>r_2 \\ 2/r_2, & r_1<r_2 \end{cases}$$

である．したがって

$$\begin{aligned}
J &= \int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\lambda r_1}r_1{}^2\mathrm{d}r_1\int_0^{\pi}\sin\theta_1\mathrm{d}\theta_1\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi_1\cdot4\pi\left[\frac{1}{r_1}\int_0^{r_1}\mathrm{e}^{-\lambda r_2}r_2{}^2\mathrm{d}r_2+\int_{r_1}^{\infty}\mathrm{e}^{-\lambda r_2}r_2\mathrm{d}r_2\right] \\
&= (4\pi)^2\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\lambda r_1}r_1\mathrm{d}r_1\left[\int_0^{r_1}\mathrm{e}^{-\lambda r_2}r_2{}^2\mathrm{d}r_2+r_1\int_{r_1}^{\infty}\mathrm{e}^{-\lambda r_2}r_2\mathrm{d}r_2\right] \\
&= (4\pi)^2\left[\frac{2}{\lambda^3}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-\lambda r_1}r_1\mathrm{d}r_1-\frac{1}{\lambda}\int_0^{\infty}\mathrm{e}^{-2\lambda r_1}r_1\left(\frac{r_1}{\lambda}+\frac{2}{\lambda^2}\right)\mathrm{d}r_1\right] \\
&= \frac{(4\pi)^2}{\lambda^5}\left[2-\frac{2}{8}-\frac{2}{4}\right] = \frac{(4\pi)^2}{\lambda^5}\cdot\frac{5}{4}.
\end{aligned}$$

これより

$$J_{1,1} = \left(\frac{Z^3}{\pi {a_0}^3}\right)^2 \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \cdot (4\pi)^2 \cdot \frac{5}{4}\left(\frac{a_0}{2Z}\right)^5 = \frac{5}{4}\cdot\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0}.$$

問 47　(3.14)の右辺の第 2 項と第 3 項で，$\alpha=5/16$ とおいたものが，摂動の第 1 近似 $E^{(1)}$ にほかならない．したがって

$$E^{(1)} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0}\left[4\alpha(Z-\alpha)-\frac{5}{4}(Z-\alpha)\right]$$
$$= -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 a_0}\left[4\cdot\frac{5}{16}\left(Z-\frac{5}{16}\right)-\frac{5}{4}\left(Z-\frac{5}{16}\right)\right] = 0\,.$$

問 48　試行関数を規格化すると

$$\psi(r) = \sqrt{\frac{1}{8\pi}\left(\frac{\kappa}{a}\right)^3}\,\mathrm{e}^{-\kappa r/2a}$$

である．試行関数は球対称であるから，このときハミルトニアンは

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)-V_0\mathrm{e}^{-r/a}$$

と表わされる．これらを用いると

$$\begin{aligned}E_{\mathrm{G}} &= \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{8\pi}\left(\frac{\kappa}{a}\right)^3\cdot 4\pi\int_0^\infty r^2\mathrm{d}r\,\mathrm{e}^{-\kappa r/2a}\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)-V_0\mathrm{e}^{-r/a}\right]\mathrm{e}^{-\kappa r/2a} \\ &= \frac{1}{2}\left(\frac{\kappa}{a}\right)^3\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\cdot\frac{\kappa}{2a}\int_0^\infty \mathrm{e}^{-\kappa r/a}\left(2r-\frac{\kappa}{2a}r^2\right)\mathrm{d}r - V_0\int_0^\infty \mathrm{e}^{-(1+\kappa)r/a}r^2\mathrm{d}r\right] \\ &= \frac{\hbar^2}{8\mu}\left(\frac{\kappa}{a}\right)^2-\frac{\kappa^3}{(1+\kappa)^3}V_0 \qquad (1)\end{aligned}$$

をえる．ここで $\mathrm{d}E_{\mathrm{G}}/\mathrm{d}\kappa=0$ を要求して，えられた V_0 を(1)に代入すると，それぞれ

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{12\mu a^2}\frac{(1+\kappa)^4}{\kappa}, \qquad E_{\mathrm{G}} = -\frac{\hbar^2}{24\mu a^2}\kappa^2(2\kappa-1)$$

である．ここで，$\hbar^2/\mu a^2=0.28\times10^{-11}$ J，$E_{\mathrm{G}}=-2.23$ MeV $=-3.57\times10^{-13}$ J を第 2 式に代入すると，$\kappa^2(2\kappa-1)=3.05$．これより $\kappa=1.35$ と決まる．この値を V_0 に代入すると，$V_0=52.6\times10^{-13}$ J $=32.8$ MeV となる．

問 49　$H=H_1^{(0)}+H_2^{(0)}+V_{12}$ として，直交性

$$\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_b^*(\boldsymbol{r})\varphi_a(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_a^*(\boldsymbol{r})\varphi_b(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r = 0$$

を利用すると

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)(H_1^{(0)}+H_2^{(0)}+V_{12})\psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_a^*(\boldsymbol{r})H^{(0)}\varphi_a(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r+\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_b^*(\boldsymbol{r})H^{(0)}\varphi_b(\boldsymbol{r})\mathrm{d}^3r$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty}|\varphi_a(\boldsymbol{r})|^2V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')|\varphi_b(\boldsymbol{r}')|^2\mathrm{d}^3r\,\mathrm{d}^3r'$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_b^*(\boldsymbol{r})\varphi_a(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi_a^*(\boldsymbol{r}')\varphi_b(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'\mathrm{d}^3r$$

となる．ここで $H^{(0)}=-(\hbar^2/2m)\triangle-Ze^2/4\pi\varepsilon_0r$，$V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')=e^2/4\pi\varepsilon_0|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ である．さて，作用積分を

$$I=\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_a^*H^{(0)}\varphi_a\mathrm{d}^3r+\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_b^*H^{(0)}\varphi_b\mathrm{d}^3r$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_a^*(\boldsymbol{r})\varphi_a(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi_b^*(\boldsymbol{r}')\varphi_b(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'\mathrm{d}^3r$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_b^*(\boldsymbol{r})\varphi_a(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi_a^*(\boldsymbol{r}')\varphi_b(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'\mathrm{d}^3r$$

$$-\mathcal{E}_a\left[\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_a^*\varphi_a\mathrm{d}^3r-1\right]-\mathcal{E}_b\left[\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_b^*\varphi_b\mathrm{d}^3r-1\right]$$

とし，変分 $\delta\varphi_a^*$, $\delta\varphi_b^*$ をとると

$$\delta I=\int_{-\infty}^{\infty}\delta\varphi_a^*H^{(0)}\varphi_a\mathrm{d}^3r+\int_{-\infty}^{\infty}\delta\varphi_b^*H^{(0)}\varphi_b\mathrm{d}^3r$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty}\delta\varphi_a^*(\boldsymbol{r})\varphi_a(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi_b^*(\boldsymbol{r}')\varphi_b(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'\mathrm{d}^3r$$

$$+\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_a^*(\boldsymbol{r})\varphi_a(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta\varphi_b^*(\boldsymbol{r}')\varphi_b(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'\mathrm{d}^3r$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty}\delta\varphi_b^*(\boldsymbol{r})\varphi_a(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\varphi_a^*(\boldsymbol{r}')\varphi_b(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'\mathrm{d}^3r$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty}\varphi_b^*(\boldsymbol{r})\varphi_a(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta\varphi_a^*(\boldsymbol{r}')\varphi_b(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'\mathrm{d}^3r$$

$$-\mathcal{E}_a\int_{-\infty}^{\infty}\delta\varphi_a^*\varphi_a\mathrm{d}^3r-\mathcal{E}_b\int_{-\infty}^{\infty}\delta\varphi_b^*\varphi_b\mathrm{d}^3r=0.$$

変分 $\delta\varphi_a^*$ と $\delta\varphi_b^*$ は独立であるから，これより

$$H^{(0)}\varphi_a(\boldsymbol{r})+\int_{-\infty}^{\infty}V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')|\varphi_b(\boldsymbol{r}')|^2\mathrm{d}^3r'\varphi_a(\boldsymbol{r})$$

$$-\int_{-\infty}^{\infty}V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,\varphi_b^*(\boldsymbol{r}')\varphi_a(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'\varphi_b(\boldsymbol{r})=\mathcal{E}_a\varphi_a(\boldsymbol{r}),$$

$$H^{(0)}\varphi_b(\boldsymbol{r})+\int_{-\infty}^{\infty}V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')|\varphi_a(\boldsymbol{r}')|^2\mathrm{d}^3r'\varphi_b(\boldsymbol{r})$$
$$-\int_{-\infty}^{\infty}V(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,\varphi_a^*(\boldsymbol{r}')\varphi_b(\boldsymbol{r}')\mathrm{d}^3r'\varphi_a(\boldsymbol{r}) = \mathcal{E}_b\varphi_b(\boldsymbol{r}).$$

これらの方程式は，(4.11)の Hartree-Fock の方程式の $N=2$ の場合になっている．

問 50　$p=q=p'=q'$ のとき，(6.31)の最初の表式は

$$\frac{1}{2}\sum_p\sum_{n_1,n_2,\cdots,n_\infty}\langle p,p|\hat{V}|p,p\rangle n_p(n_p-1)F(n_1,n_2,\cdots,n_p,\cdots,n_\infty;t)|n_1,n_2,\cdots,n_p,\cdots,n_\infty\rangle$$

と表わされる．ここで

$$\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p\hat{a}_p = \hat{a}_p^\dagger(\hat{a}_p\hat{a}_p^\dagger-1)\hat{a}_p = \hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p\cdot\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p-\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p = \hat{n}_p(\hat{n}_p-1)$$

より，

$$\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p\hat{a}_p|n_1,\cdots,n_p,\cdots,n_\infty\rangle = \hat{n}_p(\hat{n}_p-1)|n_1,\cdots,n_p,\cdots,n_\infty\rangle$$
$$= n_p(n_p-1)|n_1,\cdots,n_p,\cdots,n_\infty\rangle$$

となるから，上の表式は

$$\frac{1}{2}\sum_p\langle p,p|\hat{V}|p,p\rangle\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p\hat{a}_p\sum_{n_1,n_2,\cdots,n_\infty}F(n_1,n_2,\cdots,n_p,\cdots,n_\infty;t)|n_1,n_2,\cdots,n_p,\cdots,n_\infty\rangle$$
$$=\frac{1}{2}\sum_p\langle p,p|\hat{V}|p,p\rangle\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_p\hat{a}_p|\Psi(t)\rangle$$

となる．

問 51　$\hat{\psi}(\boldsymbol{x})=\sum_k\hat{a}_k\phi_k(\boldsymbol{x})$ を代入すると

$$\psi_{p,q}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}}\sum_k\sum_l\phi_k(\boldsymbol{r}_1)\phi_l(\boldsymbol{r}_2)\langle 0|\hat{a}_k\hat{a}_l|0_1,0_2,\cdots,1_p,\cdots,1_q,\cdots,0_\infty\rangle$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2!}}\sum_k\sum_l\phi_k(\boldsymbol{r}_1)\phi_l(\boldsymbol{r}_2)\langle 0|\hat{a}_k\hat{a}_l\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_q^\dagger|0\rangle. \tag{1}$$

ここで

$$[\hat{a}_k\hat{a}_l,\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_q^\dagger] = [\hat{a}_k,\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_q^\dagger]\hat{a}_l+\hat{a}_k[\hat{a}_l,\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_q^\dagger]$$
$$= \hat{a}_p^\dagger[\hat{a}_k,\hat{a}_q^\dagger]\hat{a}_l+[\hat{a}_k,\hat{a}_p^\dagger]\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_l+\hat{a}_k\hat{a}_p^\dagger[\hat{a}_l,\hat{a}_q^\dagger]+\hat{a}_k[\hat{a}_l,\hat{a}_p^\dagger]\hat{a}_q^\dagger$$
$$= \hat{a}_p^\dagger\hat{a}_l\delta_{k,q}+\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_l\delta_{k,p}+\hat{a}_k\hat{a}_p^\dagger\delta_{l,q}+\hat{a}_k\hat{a}_q^\dagger\delta_{l,p}$$
$$= \hat{a}_p^\dagger\hat{a}_l\delta_{k,q}+\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_l\delta_{k,p}+\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_k\delta_{l,q}+\delta_{k,p}\delta_{l,q}+\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_k\delta_{l,p}+\delta_{k,q}\delta_{l,p}.$$

$\hat{a}_p|0\rangle=0$ であるから

$$\langle 0|\hat{a}_k\hat{a}_l\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_q^\dagger|0\rangle = \delta_{k,p}\delta_{l,q}+\delta_{k,q}\delta_{l,p}.$$

これを(1)の右辺に代入すると

$$\psi_{p,q}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \sum_{k,l} \phi_k(\boldsymbol{r}_1)\phi_l(\boldsymbol{r}_2)[\delta_{k,p}\delta_{l,q} + \delta_{k,q}\delta_{l,p}]$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2!}}[\phi_p(\boldsymbol{r}_1)\phi_q(\boldsymbol{r}_2) + \phi_q(\boldsymbol{r}_1)\phi_p(\boldsymbol{r}_2)].$$

すなわち，$\psi_{p,q}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ は対称化された固有関数である．

問 52　$i\hbar\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t)/\partial t = [\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t), \hat{H}]$ において

$$\hat{H} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x' \, \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t) K(\boldsymbol{x}') \hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)$$
$$+ \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x' \mathrm{d}^3x'' \, \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'', t) V(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}'')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t).$$

まず

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)K(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)] = [\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)]K(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)$$
$$= \delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')K(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t),$$

次に

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)]$$
$$= [\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'', t)]\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)$$
$$= [\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)]\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)$$
$$+ \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t), \hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'', t)]\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)$$
$$= \delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t) + \delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'')\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t).$$

これらより

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t), \hat{H}] = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x' \, \delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')K(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)$$
$$+ \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x' \mathrm{d}^3x'' \, V(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}'')\delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)$$
$$+ \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x' \mathrm{d}^3x'' \, V(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}'')\delta^3(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'')\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)$$
$$= K(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x'' \, V(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}'')\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t)$$
$$+ \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x' \, V(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x})\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)$$
$$= K(\boldsymbol{x})\hat{\psi}(\boldsymbol{x}) + \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3x' \, V(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}')\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t).$$

最後の等号では $V(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}') = V(\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x})$ と，Bose 系の交換関係 $[\hat{\psi}(\boldsymbol{x}, t), \hat{\psi}(\boldsymbol{x}', t)] = 0$ を用いている．

問 53　$\hat{\psi}(\boldsymbol{x})=\sum_k \hat{a}_k\phi_k(\boldsymbol{x})$ を代入すると

$$\psi_{p,q}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2!}}\sum_{k,l}\phi_k(\boldsymbol{r}_1)\phi_l(\boldsymbol{r}_2)\langle 0|\hat{a}_k\hat{a}_l|0_1,0_2,\cdots,1_q,\cdots,1_p,\cdots,0_\infty\rangle$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2!}}\sum_{k,l}\phi_k(\boldsymbol{r}_1)\phi_l(\boldsymbol{r}_2)\langle 0|\hat{a}_k\hat{a}_l\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_p^\dagger|0\rangle.$$

ここで反交換関係により

$$\hat{a}_k\hat{a}_l\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_p^\dagger=\hat{a}_k(\delta_{l,q}-\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_l)\hat{a}_p^\dagger=\delta_{l,q}\hat{a}_k\hat{a}_p^\dagger-\hat{a}_k\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_l\hat{a}_p^\dagger$$
$$=\delta_{l,q}(\delta_{k,p}-\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_k)-\hat{a}_k\hat{a}_q^\dagger(\delta_{l,p}-\hat{a}_p^\dagger\hat{a}_l).$$

$\hat{a}_k|0\rangle=0$ より

$$\hat{a}_k\hat{a}_l\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_p^\dagger|0\rangle=(\delta_{l,q}\delta_{k,p}-\delta_{l,p}\hat{a}_k\hat{a}_q^\dagger)|0\rangle$$
$$=\{\delta_{l,q}\delta_{k,p}-\delta_{l,p}(\delta_{k,q}-\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_k)\}|0\rangle=(\delta_{l,q}\delta_{k,p}-\delta_{l,p}\delta_{k,q})|0\rangle.$$

したがって

$$\langle 0|\hat{a}_k\hat{a}_l\hat{a}_q^\dagger\hat{a}_p^\dagger|0\rangle=\delta_{l,q}\delta_{k,p}-\delta_{l,p}\delta_{k,q}.$$

これより

$$\psi_{p,q}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)=\frac{1}{\sqrt{2!}}\sum_{k,l}\phi_k(\boldsymbol{r}_1)\phi_l(\boldsymbol{r}_2)\{\delta_{l,q}\delta_{k,p}-\delta_{l,p}\delta_{k,q}\}$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2!}}[\phi_p(\boldsymbol{r}_1)\phi_q(\boldsymbol{r}_2)-\phi_q(\boldsymbol{r}_1)\phi_p(\boldsymbol{r}_2)]$$

がえられる．

問 54　本文の理論をみると，1 粒子演算子と第 2 量子化された演算子の間には，例えば

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\longrightarrow-\frac{\hbar^2}{2m}\int \mathrm{d}^3x\,\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x})\triangle\hat{\psi}(\boldsymbol{x})$$

の対応関係がある．したがって，いまの場合

$$\xi(r)\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{s}=\xi(r)(s_xL_x+s_yL_y+s_zL_z)$$
$$=\xi(r)\frac{\hbar}{2}\left\{\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}L_x+\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}L_y+\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}L_z\right\}$$
$$\longrightarrow\frac{\hbar}{2}\int \mathrm{d}^3x\,\xi(|\boldsymbol{x}|)\left\{(\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},+),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},-))\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}L_x\hat{\psi}(\boldsymbol{x},+)\\L_x\hat{\psi}(\boldsymbol{x},-)\end{pmatrix}\right.$$
$$+(\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},+),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},-))\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}L_y\hat{\psi}(\boldsymbol{x},+)\\L_y\hat{\psi}(\boldsymbol{x},-)\end{pmatrix}$$
$$\left.+(\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},+),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},-))\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}L_z\hat{\psi}(\boldsymbol{x},+)\\L_z\hat{\psi}(\boldsymbol{x},-)\end{pmatrix}\right\}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\int \mathrm{d}^3x\,\xi(|\boldsymbol{x}|)\{\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},+)L_x\hat{\psi}(\boldsymbol{x},-)+\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},-)L_x\hat{\psi}(\boldsymbol{x},+)$$
$$-i\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},+)L_y\hat{\psi}(\boldsymbol{x},-)+i\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},-)L_y\hat{\psi}(\boldsymbol{x},+)$$
$$+\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},+)L_z\hat{\psi}(\boldsymbol{x},+)-\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},-)L_z\hat{\psi}(\boldsymbol{x},-)\}$$

となる．ここで $\hat{\psi}(\boldsymbol{x},+)$ と $\hat{\psi}(\boldsymbol{x},-)$ は，それぞれスピン上向きと下向きの粒子を 1 個減少させる演算子であり，$\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x},\pm)$ は，それぞれの方向のスピンをもつ粒子を 1 個増大させる演算子である．なお，$\boldsymbol{L}=\frac{\hbar}{i}\boldsymbol{x}\times\nabla$ である．

問 55　$i\hbar\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)/\partial t=[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\,\hat{H}]$ において，$K(\boldsymbol{x})=-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle$ とすると

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)K(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)]$$
$$=\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)K(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)-\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)K(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$$
$$+\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)K(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)-\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)K(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)$$
$$=\{\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\}K(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)-\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)K(\boldsymbol{x}')\{\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t),\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)\}$$
$$=\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')K(\boldsymbol{x}')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t).$$

最初の等号のあとの第 3 項と第 4 項は同じものを加えて引いてある．最後の等号では $\{\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t),\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)\}=0$ を用いた．

$$[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\frac{1}{2}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'',t)V(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}'')\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)]$$
$$=\frac{1}{2}V(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}'')\{\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)$$
$$-\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$$
$$+\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)$$
$$-\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)\}$$
$$=\frac{1}{2}V(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}'')[\{\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)$$
$$-\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\{\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)+\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)\}]$$
$$=\frac{1}{2}V(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}'')[\{\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\}\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)$$
$$-\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\{\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'',t)\}\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)]$$
$$=\frac{1}{2}V(\boldsymbol{x}'-\boldsymbol{x}'')[\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)$$
$$-\delta^3(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')\hat{\psi}^\dagger(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)].$$

ここで最初の等号のあとの第 3 項と第 4 項は同じものを加えて引き，2 番目の等号では第 2 項の $\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$ を $\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)$ の左に移している．このとき符号は変わらない．

上の結果を利用すると

$$i\hbar\frac{\partial\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)}{\partial t}=[\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t),\hat{H}]=K\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$$
$$+\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}'')\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}'',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}'',t)\mathrm{d}^3x''\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$$
$$-\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)\mathrm{d}^3x'$$
$$=-\frac{\hbar^2}{2m}\triangle\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)+\int_{-\infty}^{\infty}V(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')\hat{\psi}^{\dagger}(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)\mathrm{d}^3x'\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t).$$

ここで最後の等号では，$\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)=-\hat{\psi}(\boldsymbol{x}',t)\hat{\psi}(\boldsymbol{x},t)$ のいれかえをしている．

問 56

$$G_0^{(+)}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{k^2-k'^2+i\varepsilon}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{r}}\mathrm{d}^3k'$$

の場合を考える．$G_0^{(-)}(\boldsymbol{r})$ も同様にできる．$\boldsymbol{r}$ の方向を z 軸にとり，波数ベクトル $\boldsymbol{k}'$ の極座標を (k',θ',φ') で表わすと

$$G_0^{(+)}(\boldsymbol{r})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_0^{\infty}\frac{k'^2\,\mathrm{d}k'}{k^2-k'^2+i\varepsilon}\int_0^{\pi}\mathrm{e}^{ik'r\cos\theta'}\sin\theta'\,\mathrm{d}\theta'\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi'$$
$$=\frac{1}{(2\pi)^2}\cdot\frac{1}{ir}\int_0^{\infty}\frac{k'(\mathrm{e}^{ik'r}-\mathrm{e}^{-ik'r})}{k^2-k'^2+i\varepsilon}\mathrm{d}k'=\frac{1}{(2\pi)^2}\cdot\frac{1}{2ir}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{k'(\mathrm{e}^{ik'r}-\mathrm{e}^{-ik'r})}{k^2-k'^2+i\varepsilon}\mathrm{d}k' \quad (1)$$

となる．最後の等号では，被積分関数が k' に関して偶関数であることを利用して，積分範囲を $-\infty$ から $+\infty$ までに拡げている．被積分関数を部分分数に分解すると

$$\frac{k'}{k^2-k'^2+i\varepsilon}=-\frac{1}{2}\left[\frac{1}{k'+k+i\varepsilon'}+\frac{1}{k'-k-i\varepsilon'}\right]$$

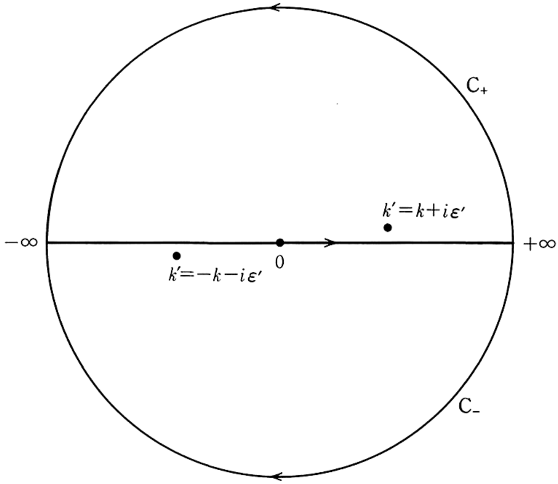
となる．ここで $\varepsilon'=\varepsilon/2k$ である．したがって(1)は，

$$G_0^{(+)}(\boldsymbol{r})=\frac{-1}{(4\pi)^2ir}\left[\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{1}{k'+k+i\varepsilon'}+\frac{1}{k'-k-i\varepsilon'}\right\}\mathrm{e}^{ik'r}\mathrm{d}k'\right.$$
$$\left.-\int_{-\infty}^{\infty}\left\{\frac{1}{k'+k+i\varepsilon'}+\frac{1}{k'-k-i\varepsilon'}\right\}\mathrm{e}^{-ik'r}\mathrm{d}k'\right]. \quad (2)$$

(2)の積分は $k'=-k-i\varepsilon'$ と $k'=k+i\varepsilon'$ に1次の極をもつ．(2)の右辺の第1項の積分において，$\mathrm{e}^{ik'r}$ は $k'\to ik'$ にしたとき，$\mathrm{e}^{-k'r}$ となり，$k'\to+\infty$ で0となる．そこで，k' の複素平面において，解答図(問56)の積分路 C_+ をとることができる．すなわち，第1項の積分は

$$\int_{\mathrm{C}_+}\frac{\mathrm{e}^{ik'r}}{k'+k+i\varepsilon'}\mathrm{d}k'+\int_{\mathrm{C}_+}\frac{\mathrm{e}^{ik'r}}{k'-k-i\varepsilon'}\mathrm{d}k'$$

でおきかえられる．1番目の積分では C_+ の積分路のなかに極はないから，この値は0であり，2番目の積分の値は留数定理により $2\pi i\mathrm{e}^{ikr}$ で与えられる．(2)の右辺の第2項



解答図(問 56)

の積分では，図の C₋ の積分路をとる．このとき

$$\int_{C_-} \frac{e^{-ik'r}}{k'-k-i\varepsilon'} dk' = 0$$

であり，

$$\int_{C_-} \frac{e^{-ik'r}}{k'+k+i\varepsilon'} dk' = -2\pi i \, e^{-i(-k)r} = -2\pi i \, e^{ikr}$$

となる．これらの結果を(2)に代入すると

$$G_0^{(+)}(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{(4\pi)^2 i r}[2\pi i - (-2\pi i)] e^{ikr} = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}.$$

問 57　$\varepsilon \to 0$ の極限を計算の途中でとってはならない．$\varepsilon \to 0$ をとるまえの方程式は，$(E_i - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon)|\Psi_i^{(\pm)}\rangle = \pm i\varepsilon |\Phi_i\rangle + \hat{V}|\Psi_i^{(\pm)}\rangle$ である．これを用いると

$$\begin{aligned}
|\Psi_i^{(\pm)}\rangle &= |\Phi_i\rangle + \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}\hat{V}|\Psi_i^{(\pm)}\rangle \\
&= |\Phi_i\rangle + \frac{1}{E_i - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}\{(E_i - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon)|\Psi_i^{(\pm)}\rangle \mp i\varepsilon |\Phi_i\rangle\} \\
&= |\Phi_i\rangle + |\Psi_i^{(\pm)}\rangle + \frac{\mp i\varepsilon}{E_i - \hat{H}_0 \pm i\varepsilon}|\Phi_i\rangle \\
&= |\Phi_i\rangle + |\Psi_i^{(\pm)}\rangle + \frac{\mp i\varepsilon}{E_i - E_i \pm i\varepsilon}|\Phi_i\rangle = |\Phi_i\rangle + |\Psi_i^{(\pm)}\rangle - |\Phi_i\rangle
\end{aligned}$$

$$= |\Psi_i^{(\pm)}\rangle$$

で，矛盾はない．

問 58　(1.51)と(1.52)で別々に定義された S-演算子を，それぞれ $\hat{U}(+\infty,-\infty)$ および $\hat{U}'(+\infty,-\infty)$ と書く．(1.52)から出発すると

$$\begin{aligned}
\hat{U}'(+\infty,-\infty) &= 1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt'\, e^{-\epsilon|t'|/\hbar}\,\hat{U}(+\infty,t')\,\hat{V}_I(t') \\
&= 1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt'\, e^{-\epsilon|t'|/\hbar}\left[1-\frac{i}{\hbar}\int_{t'}^{\infty}dt''\, e^{-\epsilon|t''|/\hbar}\,\hat{V}_I(t'')\hat{U}(t'',t')\right]\hat{V}_I(t') \\
&= 1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt' e^{-\epsilon|t'|/\hbar}\hat{V}_I(t') \\
&\quad +\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}dt'\, e^{-\epsilon|t'|/\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt''\,\theta(t''-t')e^{-\epsilon|t''|/\hbar}\,\hat{V}_I(t'')\hat{U}(t'',t')\hat{V}_I(t') \\
&= 1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt'\, e^{-\epsilon|t'|/\hbar}\,\hat{V}_I(t') \\
&\quad +\left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2\int_{-\infty}^{\infty}dt''\, e^{-\epsilon|t''|/\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt'\,\theta(t'-t'')e^{-\epsilon|t'|/\hbar}\,\hat{V}_I(t')\hat{U}(t',t'')\hat{V}_I(t'') \\
&= 1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt'\, e^{-\epsilon|t'|/\hbar}\,\hat{V}_I(t')\left[1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t'}dt''\, e^{-\epsilon|t''|/\hbar}\,\hat{U}(t',t'')\hat{V}_I(t'')\right] \\
&= 1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt'\, e^{-\epsilon|t'|/\hbar}\,\hat{V}_I(t')\hat{U}(t',-\infty) = \hat{U}(+\infty,-\infty).
\end{aligned}$$

上の変形で，2 番目の等号では(1.17)を用い，3 番目の等号では，階段関数

$$\theta(t) = \begin{cases} 1, & t \geqq 0 \\ 0, & t < 0 \end{cases}$$

を利用して，t'' に関する積分範囲を $-\infty$ に延長し，4 番目の等号では，積分変数 t' と t'' をいれかえ，5 番目の等号では，2 重積分の順序をいれかえてから，θ-関数をはずし，6 番目の等号では(1.16)を用い，最後の等号で(1.51)の定義を用いた．

次に(1.53)が(1.51)と一致することを示す．(1.51)から出発すると，

$$\begin{aligned}
\hat{U}(+\infty,-\infty) &= 1-\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}dt'\, e^{-\epsilon|t'|/\hbar}\,\hat{V}_I(t')\hat{U}(t',0)\cdot\hat{U}(0,-\infty) \\
&= 1-\frac{i}{\hbar}\left[\int_0^{\infty}dt'+\int_{-\infty}^{0}dt'\right]e^{-\epsilon|t'|/\hbar}\,\hat{V}_I(t')\hat{U}(t',0)\cdot\hat{U}(0,-\infty) \\
&= 1+\{\hat{U}(+\infty,0)-1\}\hat{U}(0,-\infty)-\{\hat{U}(-\infty,0)-1\}\hat{U}(0,-\infty) \\
&= 1+\hat{U}(+\infty,0)\cdot\hat{U}(0,-\infty)-\hat{U}(-\infty,0)\cdot\hat{U}(0,-\infty) \\
&= \hat{U}(+\infty,0)\cdot\hat{U}(0,-\infty).
\end{aligned}$$

上の変形で，1 番目の等号では(1.19)の第 1 式を用い，3 番目の等号では(1.17)の定義

を利用し，最後の等号は(1.45)による．

問 59　$|\Psi_i^{(+)}\rangle$ のなかに $(E_i-E_f)^{-1}$ に比例する項が含まれていて，$x\cdot\dfrac{1}{x}\delta(x)\neq 0$ である．(1.55)で $\varepsilon\to 0$ の極限をとるまえには

$$S_{f,i}=\delta_{f,i}-\frac{2i\varepsilon}{(E_f-E_i)^2+\varepsilon^2}\langle\boldsymbol{\Phi}_f^{(L)}|(\hat{H}-E_f)|\Psi_i^{(+)}\rangle \qquad (1)$$

である．なお，第2章(1.29)により $\varepsilon/(x^2+\varepsilon^2)\xrightarrow[\varepsilon\to 0]{}\pi\delta(x)$ である．さて，(1.29)で $\varepsilon\to 0$ の極限をとるまえの方程式 $\hat{H}|\Psi_i^{(+)}\rangle=(E_i+i\varepsilon)|\Psi_i^{(+)}\rangle-i\varepsilon|\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle$ を(1)に代入すると

$$\begin{aligned}S_{f,i}&=\delta_{f,i}-\frac{2\varepsilon^2}{(E_f-E_i)^2+\varepsilon^2}\delta_{f,i}-\frac{2i\varepsilon}{(E_f-E_i)^2+\varepsilon^2}(E_i-E_f+i\varepsilon)\langle\boldsymbol{\Phi}_f^{(L)}|\Psi_i^{(+)}\rangle\\&=\delta_{f,i}-\frac{2\varepsilon^2}{(E_f-E_i)^2+\varepsilon^2}\delta_{f,i}\\&\quad-\frac{2i\varepsilon}{(E_f-E_i)^2+\varepsilon^2}(E_i-E_f+i\varepsilon)\langle\boldsymbol{\Phi}_f^{(L)}|\left\{|\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}\rangle+\frac{1}{E_i-\hat{H}_0+i\varepsilon}\hat{V}|\Psi_i^{(+)}\rangle\right\}\\&=\delta_{f,i}-\frac{2\varepsilon^2}{(E_f-E_i)^2+\varepsilon^2}\delta_{f,i}+\frac{2\varepsilon^2}{(E_f-E_i)^2+\varepsilon^2}\delta_{f,i}-\frac{2i\varepsilon(E_i-E_f)}{(E_f-E_i)^2+\varepsilon^2}\delta_{f,i}\\&\quad-\frac{2i\varepsilon}{(E_f-E_i)^2+\varepsilon^2}(E_i-E_f+i\varepsilon)\cdot\frac{1}{E_i-E_f+i\varepsilon}\langle\boldsymbol{\Phi}_f^{(L)}|\hat{V}|\Psi_i^{(+)}\rangle\\&=\delta_{f,i}-\frac{2i\varepsilon}{(E_f-E_i)^2+\varepsilon^2}\langle\boldsymbol{\Phi}_f^{(L)}|\hat{V}|\Psi_i^{(+)}\rangle.\end{aligned}$$

最後から2番目の表式の第4項は，$i=f$ のとき $E_i-E_f=0$ であるから0であり，この項こそ $x\delta(x)=0$ のタイプの項である．このように計算を正確にやれば，結果は元の S-行列の表式にもどってしまう．

問 60　(2.5)の関係を用いて規格化条件を変更すると

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{\Phi}_f^{(L)}|\hat{V}|\Psi_i^{(+)}\rangle&=L^{-3}\langle\phi_f|\hat{V}|\phi_i^{(+)}\rangle\\&=-\frac{4\pi}{L^3}\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\left(-\frac{1}{4\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\phi_f^*U\phi_i^{(+)}\mathrm{d}^3r\right)=-\frac{4\pi}{L^3}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}f(\theta)\end{aligned}\qquad (1)$$

となる．最後の等号では第3章(5.20)を用いている．(1)の関係より(2.12)の左辺は

$$-\frac{2}{\hbar}\mathscr{I}_m\langle\boldsymbol{\Phi}_i^{(L)}|\hat{V}|\Psi_i^{(+)}\rangle=+\frac{2}{\hbar}\cdot\frac{4\pi}{L^3}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\mathscr{I}_m f(0) \qquad (2)$$

と表わされる．

一方，(2.12)の右辺の終状態 f に関する和は，$k_x=2\pi n_x/L$ の関係と，$E_f=\hbar^2k_f^2/2m$ を用いて

$$(\Delta n_f)^3=(L/2\pi)^3k_f^2\,\mathrm{d}k_f\mathrm{d}\Omega_f=(L/2\pi)^3(m/\hbar^2)k_f\,\mathrm{d}E_f\mathrm{d}\Omega_f$$

として，次の積分で表わされる．

$$\sum_f w_{f,i} = \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\left(\frac{m}{\hbar^2}\right)\int w_{f,i}\,k_f\,\mathrm{d}E_f\,\mathrm{d}\Omega_f.$$

これに(2.1)を代入して，(1)と $k_i=k_f$ を用いると

$$\begin{aligned}
\sum_f w_{f,i} &= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\left(\frac{m}{\hbar^2}\right)\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)\int_{\Delta E_f}\delta(E_f-E_i)\,|\langle\Phi_f^{(L)}|\,\hat{V}\,|\Psi_i^{(+)}\rangle|^2\,k_f\,\mathrm{d}E_f\,\mathrm{d}\Omega_f \\
&= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\left(\frac{mk_i}{\hbar^2}\right)\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)\int|\langle\Phi_f^{(L)}|\,\hat{V}\,|\Psi_i^{(+)}\rangle|^2\,\mathrm{d}\Omega_f \\
&= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\left(\frac{mk_i}{\hbar^2}\right)\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)\left(\frac{4\pi}{L^3}\cdot\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2\int|f(\theta)|^2\,\mathrm{d}\Omega_f \\
&= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\left(\frac{mk_i}{\hbar^2}\right)\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)\left(\frac{4\pi\hbar^2}{2mL^3}\right)^2\sigma^{\mathrm{tot}} \qquad (3)
\end{aligned}$$

となる．最後の等号では全断面積が

$$\sigma^{\mathrm{tot}} = \int\mathrm{d}\Omega_f\,|f(\theta)|^2$$

で与えられることを用いている．(2)と(3)を(2.12)に代入すると

$$\frac{2}{\hbar}\cdot\left(\frac{4\pi}{L^3}\right)\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\mathcal{I}_m f(0) = \frac{L^3}{(2\pi)^3}\left(\frac{mk_i}{\hbar^2}\right)\left(\frac{2\pi}{\hbar}\right)\left(\frac{4\pi\hbar^2}{2mL^3}\right)^2\sigma^{\mathrm{tot}}$$

となる．これより，第3章(5.42)の

$$\frac{4\pi}{k_i}\mathcal{I}_m f(0) = \sigma^{\mathrm{tot}}$$

がえられる．

問 61　解答図(問 61)の(a)に示すように，実験室系からみたとき，静止している粒子2に向かって，粒子1が速さ v_0 で入射して，角 θ_L の方向に散乱されるとする．粒子1の入射方向を z 軸にとり，散乱面内の z 軸に垂直な方向を x 軸にとる．このとき，質量中心Cの速度 V は

$$V = m_1 v_0/(m_1+m_2) \qquad (1)$$

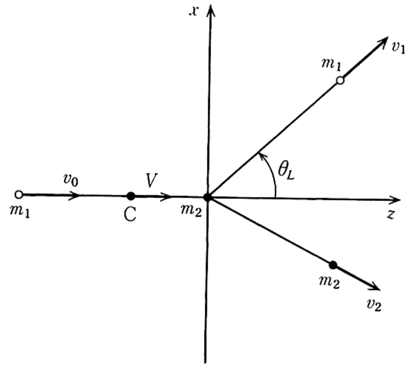
である．したがって，図(b)の質量中心系からみた入射粒子1の入射速度 $v_{0,1}'$ と，標的粒子2の速度 $v_{0,2}'$ は，

$$v_{0,1}' = v_0 - V = m_2 v_0/(m_1+m_2), \qquad v_{0,2}' = -V = -m_1 v_0/(m_1+m_2) \qquad (2)$$

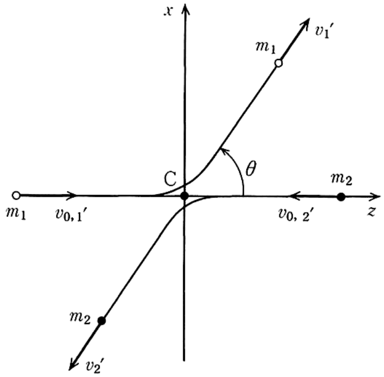
で与えられる．図(b)の質量中心系からみた衝突後の速さをそれぞれ v_1', v_2' とし，これらを v_0 で表わすことを考える．質量中心系では，全運動量は0であり，その進行方向の成分は

$$m_1 v_1' + m_2 v_2' = 0, \qquad m_1 v_{0,1}' + m_2 v_{0,2}' = 0, \qquad (3)$$

また，エネルギー保存則は



（a）実験室系



（b）質量中心系

解答図（問 61）

$$\frac{1}{2}m_1 v_1'^2 + \frac{1}{2}m_2 v_2'^2 = \frac{1}{2}m_1 v_{0,1}'^2 + \frac{1}{2}m_2 v_{0,2}'^2. \tag{4}$$

(4)の右辺に(2)を代入して，(3)を用いて v_2' を消去すると

$$v_1' = m_2 v_0/(m_1+m_2) \tag{5}$$

をえる．質量中心系での散乱角を θ とすると，v_1' の成分はそれぞれ

$$v_{1,x}' = v_1' \sin\theta = \frac{m_2 \sin\theta}{m_1+m_2}v_0, \qquad v_{1,z}' = v_1' \cos\theta = \frac{m_2\cos\theta}{m_1+m_2}v_0. \tag{6}$$

実験室系での衝突後の粒子 1 の速度の成分は，(6)の $v_{1,z}'$ に(1)の V を加えることによりえられる．すなわち

$$v_{1,x} = v_{1,x}' = \frac{m_2\sin\theta}{m_1+m_2}v_0, \qquad v_{1,z} = v_{1,z}' + V = \frac{m_1+m_2\cos\theta}{m_1+m_2}v_0. \tag{7}$$

したがって，実験室系での散乱角 θ_L は(7)を用いて

$$\cos\theta_L = \frac{v_{1,z}}{\sqrt{v_{1,x}^2+v_{1,z}^2}} = \frac{m_1+m_2\cos\theta}{\sqrt{m_1^2+m_2^2+2m_1m_2\cos\theta}} \tag{8}$$

と表わされる．

問 62　解答図(問 62)に示すように，厚さ δh の薄い板に垂直に波数 k の粒子を投射するものとする．板の内部のそれぞれの原子によって散乱されて図の P 点に到達する波は，たがいに干渉して

$$\psi^{(+)}(\mathrm{P}) = \mathrm{e}^{ikz} + N\delta h \int_0^\infty \frac{f(\theta)}{r}\mathrm{e}^{ikr}\cdot 2\pi x\,\mathrm{d}x \tag{1}$$

で与えられる．図から $x^2+z^2=r^2$ であるから，$x\mathrm{d}x=r\mathrm{d}r$ である．これより

$$\psi^{(+)}(\mathrm{P}) = \mathrm{e}^{ikz}+2\pi N\delta h\int_z^{\infty}f(\theta)\mathrm{e}^{ikr}\mathrm{d}r \tag{2}$$

となる．P 点が板から十分に離れていて z が大きく，したがって r も大きいとき，(2)の右辺の e^{ikr} は激しく振動して消えるので，$f(\theta)$ は $f(0)$ でおきかえられ，また(2)の積分の上限からの寄与は 0 としてよい．すなわち，

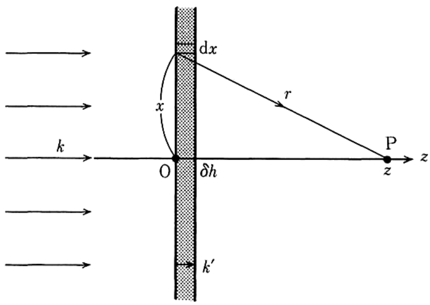
$$\psi^{(+)}(\mathrm{P}) \cong \mathrm{e}^{ikz}-2\pi N\delta h f(0)\mathrm{e}^{ikz}/ik = \mathrm{e}^{ikz}[1+2\pi iNf(0)\delta h/k]. \tag{3}$$

一方，真空中と板中での粒子の位相速度をそれぞれ v_p, v_p' とし，それぞれの波数を k, k' とすると，$\omega=v_pk$, $\omega=v_p'k'$ で，ω は共通の値をとるから，真空に対する板の屈折率は $n=v_p/v_p'=k'/k$ で与えられる．このとき，板を透過した波は

$$\psi^{(+)}(\mathrm{P}) = \mathrm{e}^{ik(z-\delta h)}\cdot\mathrm{e}^{ik'\delta h} = \mathrm{e}^{ikz}\cdot\mathrm{e}^{i(n-1)k\delta h}$$
$$\cong \mathrm{e}^{ikz}[1+i(n-1)k\delta h]. \tag{4}$$

(3)と(4)を比較すると，次の屈折率 n が与えられる．

$$n = 1+\frac{2\pi N}{k^2}f(0).$$



解答図(問 62)

問 63　標的系のハミルトニアンは $\hat{H}_\mathrm{A}=(1/2M)\sum_\alpha\hat{\boldsymbol{p}}_\alpha^2(t)$ で与えられる．これより，Heisenberg の運動方程式とその解は

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(t),\hat{H}_\mathrm{A}] = i\hbar\hat{\boldsymbol{p}}_\alpha(t)/M, \qquad i\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\boldsymbol{p}}_\alpha(t)}{\mathrm{d}t} = [\hat{\boldsymbol{p}}_\alpha(t),\hat{H}_\mathrm{A}] = 0,$$

$$\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(t) = \hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(0)+\hat{\boldsymbol{p}}_\alpha(0)t/M$$

である．したがって，$[\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(0),\ \hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(t)]=[\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(0),\ \hat{\boldsymbol{p}}_\alpha(0)]t/M=i\hbar t/M$ となる．ここで第 2 章(5.44)の公式を利用すると

$$\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(0)}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(t)} = \mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(0)-\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(t))+\frac{1}{2}[\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(0),\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}_\alpha(t)]}$$

$$= e^{i\boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}_\alpha(0)t/M + i\hbar k^2 t/2M}$$

をえる．これより

$$S(\boldsymbol{k},\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar N}\sum_\alpha \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t \langle\!\langle \exp[-i(\omega - \hbar k^2/2M - \boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}_\alpha(0)/M)t]\rangle\!\rangle. \tag{1}$$

ここで

$$\begin{aligned}
&\langle\!\langle \exp[-i(\omega - \hbar k^2/2M - \boldsymbol{k}\cdot\hat{\boldsymbol{p}}_\alpha(0)/M)t]\rangle\!\rangle \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3p\, e^{-\beta p^2/2M} e^{-i(\omega-\hbar k^2/2M)t} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{p}t/M} \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3p\, e^{-\beta p^2/2M} \\
&= e^{-i(\omega-\hbar k^2/2M)t - k^2t^2/2M\beta} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3p\, e^{-\frac{\beta}{2M}(\boldsymbol{p}-i\boldsymbol{k}t/\beta)^2} \Big/ \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}^3p\, e^{-\beta p^2/2M} \\
&= e^{-i(\omega-\hbar k^2/2M)t - k^2t^2/2M\beta}
\end{aligned} \tag{2}$$

である．最後の等号では積分路 $[(-\infty - i\alpha)\to(+\infty+i\alpha)]$ と $[-\infty\to+\infty]$ の間で，関数 $f(z)$ が特異点をもたないとき，

$$\int_{-\infty-i\alpha}^{+\infty+i\alpha} f(z)\mathrm{d}z = \int_{-\infty}^{+\infty} f(z)\mathrm{d}z \tag{3}$$

であることを用いている．(2)はすべての原子 α に対して同じ値になるので，(1)は

$$\begin{aligned}
S(\boldsymbol{k},\omega) &= \frac{1}{2\pi\hbar N}\cdot N \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\, e^{-i\omega t + i(\hbar k^2/2M)t - (k^2/2M\beta)t^2} \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} e^{-\frac{M\beta}{2k^2}\left(\omega - \frac{\hbar k^2}{2M}\right)^2} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\, e^{-\frac{k^2}{2M\beta}\left[t + \frac{iM\beta}{k^2}\left(\omega - \frac{\hbar k^2}{2M}\right)\right]^2}
\end{aligned}$$

となる．ここでも(3)の関係を用い，また公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\mathrm{d}x = \sqrt{\pi/a}$$

を利用すると

$$S(\boldsymbol{k},\omega) = \frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2\pi M\beta}{k^2}} e^{-\frac{M\beta}{2k^2}(\omega - \hbar k^2/2M)^2} = \sqrt{\frac{M\beta}{2\pi\hbar^2 k^2}} e^{-\frac{M\beta}{2k^2}(\omega-\hbar k^2/2M)^2}.$$

問 64　粒子の正準変数に関して位置表示をとると

$$v_i(t) = \frac{1}{m}\{p_i(t) - e\hat{A}_i(\boldsymbol{r}(t),t)\}$$

である．したがって

$$[x_i(t), v_j(t)] = \frac{1}{m}[x_i(t), p_j(t) - e\hat{A}_j(\boldsymbol{r}(t),t)]$$

$$= \frac{1}{m}[x_i(t),\, p_j(t)] = \frac{i\hbar}{m}\delta_{i,j}.$$

また

$$[v_i(t), v_j(t)] = \frac{1}{m^2}[p_i(t) - e\hat{A}_i(\boldsymbol{r}(t), t),\, p_j(t) - e\hat{A}_j(\boldsymbol{r}(t), t)]$$

$$= \frac{e}{m^2}\{[\hat{A}_j(\boldsymbol{r}(t), t),\, p_i(t)] - [\hat{A}_i(\boldsymbol{r}(t), t),\, p_j(t)]\}$$

$$= \frac{ie\hbar}{m^2}\left(\frac{\partial \hat{A}_j(\boldsymbol{r}(t), t)}{\partial x_i} - \frac{\partial \hat{A}_i(\boldsymbol{r}(t), t)}{\partial x_j}\right) \neq 0.$$

問 65　(1.45)の交換関係

$$[\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{x}, t),\, \hat{E}_{\perp,j}(\boldsymbol{x}', t)] = -\frac{i\hbar}{\varepsilon_0 L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}(\delta_{i,j} - k_i k_j/\boldsymbol{k}^2)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}$$

を x_i で微分して，$i=1,2,3$ の和をとると

$$[\mathrm{div}\, \hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{x}, t),\, \hat{E}_{\perp,j}(\boldsymbol{x}', t)] = -\frac{i\hbar}{\varepsilon_0 L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{i=1}^{3}(\delta_{i,j} - k_i k_j/\boldsymbol{k}^2)\, i k_i \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}$$

$$= \frac{\hbar}{\varepsilon_0 L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}(k_j - k_j)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} = 0.$$

同様にして，

$$[\hat{A}_i{}^{(\mathrm{C})}(\boldsymbol{x}, t),\, \mathrm{div}'\, \hat{\boldsymbol{E}}_{\perp}(\boldsymbol{x}', t)] = -\frac{i\hbar}{\varepsilon_0 L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{j=1}^{3}(\delta_{i,j} - k_i k_j/\boldsymbol{k}^2)(-i k_j)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')}$$

$$= -\frac{\hbar}{\varepsilon_0 L^3}\sum_{\boldsymbol{k}}(k_i - k_i)\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}')} = 0$$

で，矛盾を生じない．

問 66　(1.29)の方程式

$$\left(\triangle - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})} = -\mu_0 \boldsymbol{i}_{\perp} \qquad (1)$$

において，

$$-\frac{\partial^2 \boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}}{\partial t^2} = -\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}}{\partial t}\right) = \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{E}_{\perp}$$

であることに注意すると，(1)は

$$\frac{\partial \boldsymbol{E}_{\perp}}{\partial t} = -c^2\triangle \boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})} - \frac{1}{\varepsilon_0}\boldsymbol{i}_{\perp} \qquad (2)$$

と表わされる．ここで $c^2\mu_0=1/\varepsilon_0$ である．(1.36)および(1.35)の $\boldsymbol{E}_\perp$ と $\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}$ の展開式を(2)の両辺に代入すると

$$\frac{\partial \boldsymbol{E}_\perp}{\partial t}=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})i\omega_k\left[\frac{\mathrm{d}C_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}}{\mathrm{d}t}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}-\frac{\mathrm{d}C_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)*}}{\mathrm{d}t}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}\right], \tag{3}$$

$$-c^2\triangle\boldsymbol{A}^{(\mathrm{C})}=\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 L^3}}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})c^2\boldsymbol{k}^2[C_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}+C_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)*}\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{x}}] \tag{4}$$

となる．一方，

$$\boldsymbol{i}(\boldsymbol{x},t)=e\sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{v}_i\delta(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i)=\frac{e}{2L^3}\sum_{i}\sum_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{v}_i[\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i)}+\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i)}]$$

である．ここで，ベクトル $\boldsymbol{v}_i$ を基本ベクトル $\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ の3個の方向に分解して $\boldsymbol{v}_i=\sum_{\lambda=1}^{3}(\boldsymbol{v}_i\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})$ と書くと

$$\boldsymbol{i}(\boldsymbol{x},t)=\frac{e}{2L^3}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1}^{3}(\boldsymbol{v}_i\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})[\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i)}+\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i)}]$$

となる．したがって

$$\boldsymbol{i}_\perp(\boldsymbol{x},t)=\frac{e}{2L^3}\sum_{i=1}^{N}\sum_{\boldsymbol{k}}\sum_{\lambda=1,2}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})(\boldsymbol{v}_i\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))[\mathrm{e}^{i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i)}+\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{r}_i)}] \tag{5}$$

である．(3),(4)および(5)を(2)に代入して係数を比較し，$\omega_{\boldsymbol{k}}=ck$ の関係に注意すると

$$i\frac{\mathrm{d}C_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}}{\mathrm{d}t}=\omega_{\boldsymbol{k}}C_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}-\sum_{i=1}^{N}\frac{e}{2\omega_{\boldsymbol{k}}\sqrt{\varepsilon_0 L^3}}(\boldsymbol{v}_i\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i}$$

をえる．ここで $C_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}=a_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}\sqrt{\hbar/2\omega_{\boldsymbol{k}}}$ とおくと

$$i\hbar\frac{\mathrm{d}a_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}}{\mathrm{d}t}=\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}a_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}-\sqrt{\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}}\sum_{i=1}^{N}e(\boldsymbol{v}_i\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k}))\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_i}. \tag{6}$$

ここで c 数である $a_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}$ と $\boldsymbol{v}_i$ を演算子におきかえれば，(6)は(1.52)に一致する．係数の比較のときに，$C_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)*}$ の部分をとれば(1.52)のエルミート共役と同形の方程式がえられる．

問 67　2個の相互作用のうち，$(e^2/2m)\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})2}(0)$ の項は転移確率を e^2 の程度で求めるときにはきかない．したがって

$$w_{f,i}\mathrm{d}\Omega_f=\frac{2\pi}{\hbar}\left|\langle n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1,1|\left(-\frac{e}{m}\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)\cdot\boldsymbol{p}\right)|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)},2\rangle\right|^2\rho_f\mathrm{d}\Omega_f$$

である．ここで

$$\rho_f=\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3\frac{\hbar^2\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2}{c^3}.$$

また(2.14)の $\hat{\boldsymbol{A}}^{(\mathrm{C})}(0)$ の展開式を用いると

$$w_{f,i}\mathrm{d}\Omega_f = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{e}{m}\right)^2\left(\frac{\hbar}{2\varepsilon_0 L^3\omega_{\boldsymbol{k}}}\right)\langle n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1, 1|a_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)\dagger}\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{p}|n_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}, 2\rangle|^2\left(\frac{L}{2\pi\hbar}\right)^3\frac{\hbar^2\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2}{c^3}\mathrm{d}\Omega_f$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{e}{m}\right)^2\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0(2\pi)^3\hbar c^3}(\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1)|\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{p}_{12}|^2\mathrm{d}\Omega_f.$$

さて，$\hat{H}_0\hat{x}-\hat{x}\hat{H}_0=\left[\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2+V(\hat{r}),\ \hat{x}\right]=\frac{1}{2m}[\hat{p}_x^2,\hat{x}]=\frac{\hbar}{im}\hat{p}_x$ であるから

$$\boldsymbol{p}_{12} = \frac{im}{\hbar}\langle 1|(\hat{H}_0\hat{\boldsymbol{r}}-\hat{\boldsymbol{r}}\hat{H}_0)|2\rangle = \frac{im}{\hbar}(E_1-E_2)\langle 1|\hat{\boldsymbol{r}}|2\rangle = -im\omega_{\boldsymbol{k}}\boldsymbol{r}_{12}.$$

ここで $\omega_{\boldsymbol{k}}=(E_2-E_1)/\hbar$ である．これより $|\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{p}_{12}|^2=m^2\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2|\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}_{12}|^2$．これを代入すると

$$w_{f,i}\mathrm{d}\Omega_f = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{e}{m}\right)^2\frac{\hbar\omega_{\boldsymbol{k}}}{2\varepsilon_0(2\pi)^3\hbar c^3}m^2\omega_{\boldsymbol{k}}{}^2|\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|^2(\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1)\mathrm{d}\Omega_f$$

$$= \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)\left(\frac{\omega_{\boldsymbol{k}}{}^3}{2\pi c^2}\right)|\boldsymbol{r}_{12}\cdot\boldsymbol{e}^{(\lambda)}(\boldsymbol{k})|^2(\bar{n}_{\boldsymbol{k}}{}^{(\lambda)}+1)\mathrm{d}\Omega_f.$$

これは(3.3)と一致している．

問 68　完全性の条件 $\sum_n|n\rangle\langle n|=1$ と，$\omega_{n,i}=(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i)/\hbar$ を用いると，

$$\sum_n\omega_{n,i}\langle i|\hat{x}_l|n\rangle\langle n|\hat{x}_m|i\rangle = \frac{1}{\hbar}\sum_n\langle i|\hat{x}_l|n\rangle(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i)\langle n|\hat{x}_m|i\rangle$$

$$= \frac{1}{\hbar}\langle i|\hat{x}_l(\hat{H}_0-\mathcal{E}_i)\hat{x}_m|i\rangle$$

$$= \frac{1}{2\hbar}\langle i|(\hat{x}_l\hat{H}_0\hat{x}_m+\hat{x}_l\hat{H}_0\hat{x}_m-\hat{H}_0\hat{x}_l\hat{x}_m-\hat{x}_l\hat{x}_m\hat{H}_0)|i\rangle$$

$$= \frac{1}{2\hbar}\langle i|([\hat{x}_l,\hat{H}_0]\hat{x}_m-\hat{x}_l[\hat{x}_m,\hat{H}_0])|i\rangle, \tag{1}$$

同様にして

$$\sum_n\omega_{n,i}\langle i|\hat{x}_m|n\rangle\langle n|\hat{x}_l|i\rangle = \frac{1}{2\hbar}\langle i|([\hat{x}_m,\hat{H}_0]\hat{x}_l-\hat{x}_m[\hat{x}_l,\hat{H}_0])|i\rangle. \tag{2}$$

(1)と(2)を加えると

$$\sum_n\omega_{n,i}\{\langle i|\hat{x}_l|n\rangle\langle n|\hat{x}_m|i\rangle+\langle i|\hat{x}_m|n\rangle\langle n|\hat{x}_l|i\rangle\}$$

$$= -\frac{1}{2\hbar}\langle i|\{[\hat{x}_l,[\hat{x}_m,\hat{H}_0]]+[\hat{x}_m,[\hat{x}_l,\hat{H}_0]]\}|i\rangle. \tag{3}$$

ここで

$$[\hat{x}_m,\hat{H}_0] = \left[\hat{x}_m,\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2+V(\hat{\boldsymbol{r}})\right] = \left[\hat{x}_m,\frac{1}{2m}\hat{\boldsymbol{p}}^2\right] = i\hbar\hat{p}_m/m,$$

$$[\hat{x}_l, [\hat{x}_m, \hat{H}_0]] = (i\hbar/m)[\hat{x}_l, \hat{p}_m] = -(\hbar^2/m)\delta_{l,m}$$

を利用すると

$$(3) = -\frac{1}{2\hbar}(-\hbar^2/m)\cdot 2\delta_{l,m}\langle i|i\rangle = \frac{\hbar}{m}\delta_{l,m}.$$

問 69　ここでも完全性 $\sum_n |n\rangle\langle n|=1$ を利用すると

$$\sum_n |\boldsymbol{p}_{in}|^2(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i) = \sum_n \langle i|\hat{\boldsymbol{p}}|n\rangle(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i)\langle n|\hat{\boldsymbol{p}}|i\rangle$$

$$= \langle i|\hat{\boldsymbol{p}}(\hat{H}_0-\mathcal{E}_i)\hat{\boldsymbol{p}}|i\rangle = \frac{1}{2}\langle i|(\hat{\boldsymbol{p}}\hat{H}_0\hat{\boldsymbol{p}}+\hat{\boldsymbol{p}}\hat{H}_0\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{H}_0\hat{\boldsymbol{p}}^2-\hat{\boldsymbol{p}}^2\hat{H}_0)|i\rangle$$

$$= \frac{1}{2}\langle i|\{[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}_0]\cdot\hat{\boldsymbol{p}}-\hat{\boldsymbol{p}}\cdot[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}_0]\}|i\rangle = -\frac{1}{2}\langle i|[\hat{\boldsymbol{p}},[\hat{\boldsymbol{p}},\hat{H}_0]]|i\rangle$$

となる．ここで

$$[p_x, H_0] = \left[p_x, \frac{1}{2m_{\rm ob}}\boldsymbol{p}^2+V(\boldsymbol{r})\right] = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x}, \qquad [p_x,[p_x,H_0]] = -\hbar^2\frac{\partial^2 V}{\partial x^2}$$

であることに注意すると

$$\sum_n |\boldsymbol{p}_{in}|^2(\mathcal{E}_n-\mathcal{E}_i) = -\frac{1}{2}(-\hbar^2)\langle i|\triangle V(\hat{\boldsymbol{r}})|i\rangle = \frac{\hbar^2}{2}\langle i|\triangle\hat{V}|i\rangle.$$

問 70　(6.13)を用いると

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}(i)}{\mathrm{d}t_j} = \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}^{(i)}\left[\frac{\mathrm{d}C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_j,\cdots,\alpha_N}}{\mathrm{d}t_j}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_j,\cdots,\alpha_N*} + C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_j,\cdots,\alpha_N}\frac{\mathrm{d}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_j,\cdots,\alpha_N*}}{\mathrm{d}t_j}\right]$$

$$= \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}^{(i,j)}\left[\frac{\mathrm{d}C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}}{\mathrm{d}t_j}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N*}+\frac{\mathrm{d}C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}}{\mathrm{d}t_j}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N*}\right.$$
$$\left. + C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}\frac{\mathrm{d}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N*}}{\mathrm{d}t_j}+C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}\frac{\mathrm{d}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N*}}{\mathrm{d}t_j}\right]$$

$$= \sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}^{(i,j)}\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\left[-\sqrt{n+1}\,C_{n+1}{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{i\phi_j}\right.$$
$$+\sqrt{n}\,C_{n-1}{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{-i\phi_j}$$
$$-\sqrt{m+1}\,C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}C_{m+1}{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{-i\phi_j}$$
$$\left.+\sqrt{m}\,C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}C_{m-1}{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{i\phi_j}\right], \qquad (1)$$

同様にして

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}(i)}{\mathrm{d}t_j}=\sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_N}^{(i,j)}\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\left[-\sqrt{n+1}\,C_{n+1}{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{i\phi_j}\right.$$
$$+\sqrt{n}\,C_{n-1}{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{-i\phi_j}$$
$$-\sqrt{m+1}\,C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}C_{m+1}{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{-i\phi_j}$$
$$\left.+\sqrt{m}\,C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}C_{m-1}{}^{\alpha_1,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{i\phi_j}\right].\qquad(2)$$

(1)と(2)を加えて，α_i の和をとると

$$\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}(i)}{\mathrm{d}t_j}+\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}(i)}{\mathrm{d}t_j}$$
$$=\sum_{\alpha_1,\cdots,\alpha_i,\cdots,\alpha_N}^{(j)}\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\left[-\sqrt{n+1}\,C_{n+1}{}^{\alpha_1,\cdots,\alpha_i,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\alpha_i,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{i\phi_j}\right.$$
$$+\sqrt{n}\,C_{n-1}{}^{\alpha_1,\cdots,\alpha_i,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}C_m{}^{\alpha_1,\cdots,\alpha_i,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{-i\phi_j}$$
$$-\sqrt{m+1}\,C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\alpha_i,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N}C_{m+1}{}^{\alpha_1,\cdots,\alpha_i,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{-i\phi_j}$$
$$\left.+\sqrt{m}\,C_n{}^{\alpha_1,\cdots,\alpha_i,\cdots,\mathrm{b},\cdots,\alpha_N}C_{m-1}{}^{\alpha_1,\cdots,\alpha_i,\cdots,\mathrm{a},\cdots,\alpha_N*}\mathrm{e}^{i\phi_j}\right]$$
$$=-\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\sqrt{n+1}\,\rho_{n+1,m}{}^{\mathrm{b,a}}(j)\mathrm{e}^{i\phi_j}+\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\sqrt{n}\,\rho_{n-1,m}{}^{\mathrm{a,b}}(j)\mathrm{e}^{-i\phi_j}$$
$$-\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\sqrt{m+1}\,\rho_{n,m+1}{}^{\mathrm{a,b}}(j)\mathrm{e}^{-i\phi_j}+\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\sqrt{m}\,\rho_{n,m-1}{}^{\mathrm{b,a}}(j)\mathrm{e}^{i\phi_j}$$
$$=-\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\left[\sqrt{n+1}\,\rho_{n+1,m}{}^{\mathrm{b,a}}(j)\mathrm{e}^{i\phi_j}+\sqrt{m+1}\,\rho_{n,m+1}{}^{\mathrm{a,b}}(j)\mathrm{e}^{-i\phi_j}\right]$$
$$+\left(\frac{\mu E}{\hbar}\right)\left[\sqrt{n}\,\rho_{n-1,m}{}^{\mathrm{a,b}}(j)\mathrm{e}^{-i\phi_j}+\sqrt{m}\,\rho_{n,m-1}{}^{\mathrm{b,a}}(j)\mathrm{e}^{i\phi_j}\right]$$
$$=\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{a,a}}(j)}{\mathrm{d}t_j}+\frac{\mathrm{d}\rho_{n,m}{}^{\mathrm{b,b}}(j)}{\mathrm{d}t_j}.$$

最後の等号では，(6.19)を用いている．

索　引

（配列は原則としてヘボン式ローマ字による）

量子力学

1991 年 3 月 20 日　第 1 刷発行 ©
2011 年 6 月 24 日　第 7 刷発行

著　者　砂川重信（すなかわしげのぶ）

発行者　山口昭男

発行所　株式会社 岩波書店
〒101-8002 東京都千代田区一ツ橋 2-5-5
電話案内 03-5210-4000
http://www.iwanami.co.jp/

印刷・法令印刷　製本・牧製本

ISBN4-00-006139-9　　Printed in Japan